



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

TREBALL FI DE GRAU

Grau en Enginyeria Mecànica

ESTUDI I CARACTERITZACIÓ DEL PROCÉS D'ADSORCIÓ- DESORCIÓ DE LNG EN DIPÒSITS DE TRANSPORT HEAVY- DUTY



Memòria i annexos

Autor: Òscar Vicens Artés
Director: Carlos Ruiz Moya (UPC)
Departament Mecànica Fluids (729)
Co-Director: Johan Bruyninx (IDIADA)
Convocatòria: Maig 2019

Resum

L'objectiu d'aquest treball és estudiar i caracteritzar el procés d'adsorció-desorció del vapor del Gas Natural Liquefiet -LNG en endavant- provinent del dipòsit en transports *Heavy-Duty*. L'evaporació del LNG es degut a l'ingrés de calor pel contrast de temperatures entre l'exterior i l'interior del dipòsit. Com que el volum del dipòsit es manté constant, el combustible s'eleva la pressió i la temperatura. Quan s'assoleix la pressió màxima de tarat del dipòsit aquest vapor s'ha de ventilar. Si s'alliberés a l'atmosfera no s'estarien reduint les emissions contaminants, objectiu principal d'aquest sistema. És per això que aquest vapor s'ha de recuperar a través d'algun sistema i tornar a reintroduir-se per a ser aprofitat. Aquest sistema de recuperació s'anomena BOGRS (*Boil-Off Gas Recovery System*), i es basa en l'adsorció del vapor del LNG sobre monòlits de carbó activat - AC en endavant -.

La metodologia d'aquest treball es basa primerament en estudiar les teories que defineixen l'adsorció, totes les peculiaritats d'aquest procés, les propietats del LNG, les del AC i com interactuen entre ells. Un cop aquesta base teòrica és assolida ja es pot afrontar la simulació CFD d'aquest procés.

Resumen

El objetivo de este trabajo es estudiar y caracterizar el proceso de adsorción-desorción del vapor del Gas Natural Licuado -LNG en adelante- proveniente del depósito en transportes Heavy-Duty. La evaporación del LNG es debido al ingreso de calor por el contraste de temperaturas entre el exterior y el interior del depósito. Como el volumen del depósito se mantiene constante, el combustible se eleva de presión y temperatura. Cuando se alcanza la presión máxima de tarado del depósito este vapor se debe ventilar. Si se liberara a la atmósfera no se estarían reduciendo las emisiones contaminantes, objetivo principal de este sistema. Es por ello que este vapor se debe recuperar a través de algún sistema y volver a reintroducirse para ser aprovechado. Este sistema de recuperación llama BOGRS (Boil-Off Gas Recovery System), y se basa en la adsorción del vapor del LNG sobre monolitos de carbón activado - AC en adelante -.

La metodología de este trabajo se basa primeramente en estudiar las teorías que definen la adsorción, todas las peculiaridades de este proceso, las propiedades del LNG, las del AC y cómo interactúan entre ellos. Una vez esta base teórica es lograda ya se puede afrontar la simulación CFD de este proceso.

Abstract

The objective of this work is to study and characterize the adsorption-desorption process of Liquid Natural Gas vapour -LNG onwards- from the Heavy-Duty transport deposit. The evaporation of the LNG is due to the heat ingress by the contrast of temperatures between the outside and the inside of the tank. Since the volume of the tank stays constant, the fuel rises the pressure and the temperature. When the maximum pressure of the tank is reached, this steam must be ventilated. If it was released into the atmosphere, they would not be reducing polluting emissions, the main objective of this system. That's why this vapor must be recovered through some system and re-introduced to be harnessed. This recovery system is called BOGRS (Boil-Off Gas Recovery System) and it is based on the adsorption of LNG steam on activated carbon monoliths - AC onwards -.

The methodology of this work is based firstly on studying the theories that define the adsorption, all the peculiarities of this process, the properties of the LNG, those of the AC and how they interact with each other. Once this theoretical basis is achieved, the CFD simulation of this process can be tackled.

Agrair l'ajuda prestada pel tutor de l'EEBE Carlos Ruiz durant aquest treball.

I en especial a la meva família pel constant esforç i la incondicional presència durant tota la meva etapa com a estudiant.

Abreviacions

AC - *Activated Carbon* / Carbó Activat

BOGRS - *Boil Of Gas Recovery System*

NG - *Natural Gas* / Gas Natural

LNG - *Liquefied Natural Gas* / Gas Natural Lìquat

CNG - *Compressed Natural Gas* / Gas Natural Comprimit

ANG - *Absorbed Natural Gas* / Gas Natural Absorbit

LPG - *Liquefied Petroleum Gas* / Gas Petroli Lìquat

LBM - *Liquefied Bio-Methane* / Bio-Metà Lìquat

LBP - *Liquefied Bio-Propane* / Bio-Propà Lìquat

HVO - *Hydrogenated Vegetable Oil* / Oli Vegetal Hidrogenat

NIST - *National Institute of Standards and Technology* / Institut Nacional d'estàndards i tecnologia

EVAP - *EVAPorative Emission Control System* / Sistema de control d'emissions evaporatives

DPF - *Diesel Particulate Filter* / Filtre de partícules de dièsel

HGV - *Heavy Good Vehicles* / Vehicles "nets" pesats

UE - Unió Europea

CAD - *Computer Aides Design* / Disseny assistit per ordinador

IDE - *Integrated Development Environment* / Entorn de desenvolupament integrat

CFD - *Computational Fluid Dynamics* / Dinàmica de fluids computacional

LN2 – Liquid Nitrogen / Nitrogen líquid

ÍNDEX

Resum	1
Resumen	2
Abstract	3
Abreviacions	5
ÍNDEX	6
CAPÍTOL 1: Introducció	10
1.1. COLHD	10
1.1.1. Introducció a COLHD	10
1.1.2. Motivació i objectiu de COLHD	10
1.1.3. Problemàtica i solució plantejada	11
1.1.4. Antecedents	11
1.2. Introducció a aquest treball	12
1.2.1. Objectiu i abast d'aquest treball	12
1.2.2. Metodologia	12
1.2.3. Requeriments Previs	13
CAPÍTOL 2: El Gas Naturals i els seus sistemes	14
2.1. Introducció al Gas natural	14
2.2. LNG	14
2.2.1. Composició i processament de LNG.....	15
2.3. Tipus de sistema (DUAL-FUEL)	16
2.4. Comparació NG, LNG, ANG i CNG.	16
CAPÍTOL 3: Carbó activat (AC)	19
3.1. Introducció	19
3.2. Antecedents	19
3.3. Propietats del AC.....	20
3.3.1. Porositat	20
3.3.2. Densitat d'empaquetament/emmagatzematge	21
3.3.3. Calor d'adsorció.....	21
3.3.4. Capacitat calorífica	21
3.3.5. Temps de càrrega i descàrrega	22
3.3.6. Superfície química	23
3.3.7. Prop mecàniques.....	23

3.3.8. <i>Guard bed</i>	23
3.4. Fabricació d'AC.....	24
3.4.1. Addició a la composició	27
3.4. Carbó INGEVITY	27
CAPÍTOL 4: Característiques del procés d'adsorció – desorció.....	30
4.1. Introducció a l'adsorció	30
4.2. Introducció a les teories	30
4.3. Definició d'isoterma	32
4.4. La llei d' <i>Henry</i>	33
4.5. Adsorció en forma de monocapa	34
4.5.1. <i>Langmuir</i>	34
4.5.2. <i>Freundlich</i>	34
4.5.3. <i>Dubinin</i>	35
4.5.3.1. <i>Dubinin-Radushkevich</i> (DR)	36
4.5.3.2. <i>Dubinin-Astakhov</i> (DA)	36
4.6. Adsorció de multicapes	36
4.6.1. Teoria BET.....	36
4.6.1.1. Formació de la multicapa	39
4.7. Calor isostèrica	40
4.7.1. Calor d'adsorció.....	40
4.7.2. Càlcul de la calor isostèrica aplicant <i>Langmuir</i>	41
CAPÍTOL 5: El Criòstat	44
5.1. Explicació del Criòstat	44
5.2. Bescanviador	44
5.3.1 Nitrogen Líquid.....	46
5.2. Semblança amb ANG i condicionants	47
CAPÍTOL 6: Software utilitzat	49
6.1. Solidworks	49
6.2. Ansys	49
6.3. REFPROP – NIST Reference Fluid Properties	50
6.4. Microsoft Visual Studio	50
CAPÍTOL 7: Resistències del Criòstat (2D).....	51
CAPÍTOL 8: Estudi fluid-termodinàmic de Criòstat (3D) – SIMULACIONS	53
8.1. Introducció al software	53

8.2. User-Defined Functions (UDFs) i User-Defined Scalars (UDSs)	53
8.2.1. UDF	53
8.2.2. MACRO DEFINE	54
8.2.3. UDS	54
8.2.4. UDFs per la simulació d'adsorció	57
8.2.4.1. UDF_ADSORPTION	57
8.2.4.2. UDF_MASS	58
8.2.4.2.1. LDF model	60
8.2.4.3. UDF_ENERGY	61
8.3. Exemples de models	62
8.3.1. Mixing Elbow	62
8.3.2. Heat exchanger – Shell and Tube	65
8.3.3. <i>Porous Media</i>	67
8.3.4. Porous Media 2	74
8.3.5. Battery pack	84
8.3.6. <i>Ethanol adsorption</i>	86
8.4 Exemples d'UDFs	91
8.4.1 DEFINE_PROFILE	91
8.4.2. DEFINE_ADJUST	92
8.4.3. DEFINE_SOURCE	94
8.5. Generació del model Criòstat	97
8.5.1. Criòstat 3D	97
8.5.1.1. Simulació IB i LN2	104
8.5.2. Criòstat 2D	108
8.6. Modes d'error	109
CAPÍTOL 9: Pressupost	112
CAPÍTOL 10: Conclusions	114
CAPÍTOL 11: Bibliografia i recursos	115
CAPÍTOL 12: ANNEXOS	117
12.1. Pressupost JESMAN	117
12.2. Pressupost CRYOTHERM	118
12.3. Catàleg Transductor PX 1005 - OMEGA	122
12.4. Catàleg Manòmetre Media 05 - SAMSON	124
12.5. Catàleg vàlvula 3241-7 - SAMSON	127

12.6. Catàleg vàlvula de bola TRUNNION – SAMSON	131
12.7. Catàleg canonades - CRYOTHERM	136

CAPÍTOL 1: Introducció

1.1. COLHD

1.1.1. Introducció a COLHD

Aquest treball forma part d'un projecte europeu anomenat *COLHD (Commercial vehicles using Optimized Liquid biofuels and HVO Drivetrains)* <http://colhdproject.eu/>. Aquest projecte està enmarcat dins del programa *Horizon 2020*, un programa europeu d'innovació i investigació amb un fons de 80.000 M d'euros i una data de finalització a l'any 2020. COLHD és un projecte de finançament de la investigació i la innovació en la Unió Europea, que té com a objectiu la recerca i la innovació de diferents barreges de biocombustibles líquids en vehicles comercials, on estan implicats diferents organitzacions, empreses i universitats. Aquestes barreges contemplen des de gasos fòssils líquids, com LNG (*Liquefied Natural Gas*) o LPG (*Liquefied Petroleum Gas*), fins a Biogassos Líquids, com LBM (*Liquefied Bio-Methane*) o LBP (*Liquefied Bio-Propane*), en combinació amb HVO (*Hydrogenated Vegetable Oil*). El projecte també comprèn tots els sistemes necessaris per a la utilització d'aquests combustibles com podria ser el desenvolupament del motor i dels sistemes d'emmagatzematge i transmissió.

1.1.2. Motivació i objectiu de COLHD

Degut a l'augment d'emissions de CO, CO₂, NO_x, i SO_x durant les últimes dècades la qualitat de l'aire s'ha vist afectada. Des de l'*EURO 1*, per automòbils, o *EURO I*, per a vehicles pesats o *Heavy Duty*, en 1993, la UE ha regulat les emissions emeses per un motor dièsel. Sobretot, ha supervisat els nivells d'òxid de nitrogen (NO_x) i de partícules PM (Particulate Matter). Gràcies a aquestes restriccions els fabricants de motors no han deixat d'innovar per a tenir cabuda dins dels estàndards d'emissions europees. Un exemple va ser la creació dels DPFs (Diesel Particulate Filter), un tipus de sistema que funciona com a filtre per eliminar aquestes partícules, obligatori des de l'*Euro 5* o *EURO V* al 2009. Més recentment, en els últims anys, amb l'aplicació de l'*EURO 6* o *EURO VI* la UE s'ha centrat en la reducció de l'emissió d'òxid de nitrogen.

És per això que el projecte COLHD no s'ha centrat només en la millora dels motors dièsel, sinó que es planteja combinar aquests tipus de motors amb algun altre combustible alternatiu al dièsel. A diferència dels turismes, no es contempla l'opció de vehicles pesats elèctrics, degut al les mides de les bateries necessàries i als temps d'espera de càrrega d'aquestes. És per això que aquesta combinació de dièsel més LNG s'ha centrat en vehicles pesats.

Un altre factor pel qual s'han centrat en els vehicles *Heavy Duty* és que pràcticament un 50% del transport de mercaderies que s'efectua a la UE és a través de transport per carretera. Aquest, suposa un 25% de les emissions de gasos d'efecte hivernacle. En canvi, amb dades de 2012, els vehicles amb combustible alternatiu només representaven un 3,4% i en HGVs (*Heavy Good Vehicles*) és pràcticament inexistent degut a la forta dependència en el dièsel.

1.1.3. Problemàtica i solució plantejada

Un dels inconvenients a utilitzar gas natural és la seva poca autonomia. Per tal de solventar-ho s'ha pensat en utilitzar LNG. El LNG és gas natural (NG) comprimit i emmagatzemat de forma líquida. Per a assolir el seu estat líquid necessita una temperatura de -162°C , a pressió ambient. Degut a tractar-se d'un material criogènic, això implica un gran ingrés de calor des de l'exterior si no es posen les mesures adequades. Tot i que ja es contemplen sistemes com tancs d'emmagatzematge amb grans aïllaments, minimitzant substancialment aquest ingrés de calor, no es pot reduir a zero. Degut a aquest gradient entre la temperatura a l'interior del tanc i l'exterior, es produeix l'efecte anomenat *boil-off*, l'evaporació del LNG. El tanc d'emmagatzematge es capaç d'operar dins un rang de pressions. No obstant, quan s'assoleix la pressió màxima, deguda a l'evaporació del interior, el tanc s'ha de ventilar. Amb aquesta ventilació s'aconsegueix disminuir la pressió del tanc i restablir unes condicions estables.

Si es ventila a l'exterior, a l'atmosfera, per una banda s'estaria utilitzant LNG com a substitutiu de certa part del dièsel per a reduir emissions (CO , CO_2 , NO_x , SO_x ...), però d'altra banda s'estaria expulsant bàsicament metà. Per a crear un sistema coherent amb l'objectiu del projecte, reduir emissions, s'ha pensat en crear un sistema de recuperació d'aquest *boil-off* i que sigui reintroduït i aprofitat pel motor. Aquest sistema de recuperació se l'hi ha anomenat BOGRS (Boil Off Gas Recovery System). Per a determinar dades reals d'adsorció/desorció del AC s'ha dissenyat un criòstat. Es un sistema a través del qual aquest vapor ventilat del tanc pot ser adsorbit en un monòlit d'AC i posteriorment desorbit per a ser reaprofitat. Degut a que el procés d'adsorció és exotèrmic i el de desorció és endotèrmic, a l'interior del criòstat, envoltant l'AC, s'instal·larà un bescanviador de calor. Quan es produeixi l'adsorció es farà passar un fluid fred i quan es produeixi la desorció es farà passar un fluid calent. Així, a més d'afavorir aquests dos processos, variant els paràmetres del bescanviador, es podran fer assajos a diferents temperatures a l'interior.

1.1.4. Antecedents

Tot i que el fuel alternatiu que s'utilitzarà és LNG, degut a l'aplicació de l'adsorció-desorció, el sistema es podria equiparar a un d'ANG (Adsorbed Natural Gas). La diferència es trobarà en les condicions, ja que els sistemes ANG solen treballar a un altre rang de pressions i a temperatura ambient. Fins al moment s'han executat aproximacions amb ANG utilitzant monòlits de carbó activat d'*Ingevity*, empresa proveïdora d'AC, per a una temperatura de 10°C i una pressió de 17,34 bars. S'ha arribat a la conclusió que es necessitarien uns 170 kg d'aquests per a aguantar tot el vapor alliberat per un transport *Heavy-Duty* aturat 5 dies, el màxim establert per llei. Ara bé, s'ha de contemplar quin serien els resultats si es variés la temperatura a una molt més inferior.

Un altre sistema ja en vigor des de l'any 1971 a EEUU per a la majoria de vehicles és el cànister, denominat com a EVAP (Evaporative Emission Control System). Degut a que la gasolina és molt volàtil, és inflamable i s'evapora a temperatura ambient amb certa facilitat. Per tant, certa part d'hidrocarburs s'escapen del tanc i del carburador, i s'alliberen a l'atmosfera. Per a evitar aquesta alliberació, una espècie de recipient amb AC a l'interior reté aquests vapors. La circulació d'aquests, com l'adsorció i la desorció, són controlats amb variacions de pressions.

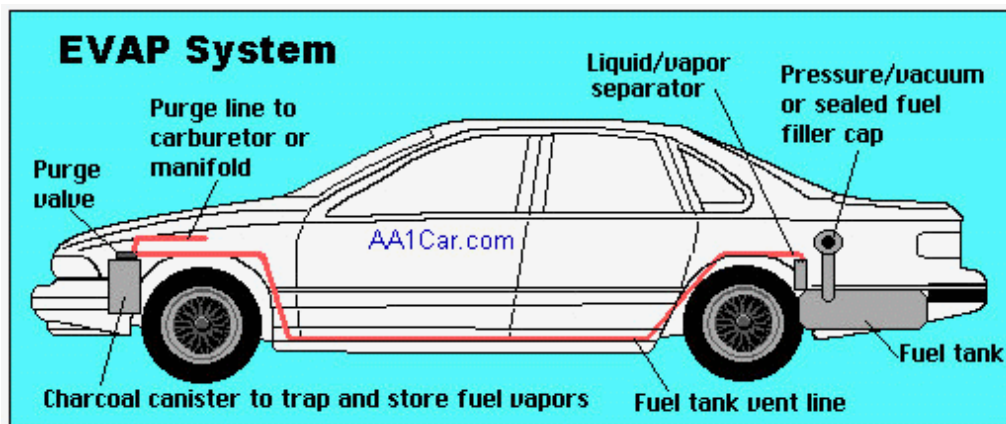


Figura 1.1. Sistema cànister

1.2. Introducció a aquest treball

1.2.1. Objectiu i abast d'aquest treball

L'objectiu d'aquest treball és estudiar el procés d'adsorció-desorció del LNG al Criòstat. Per tal de tenir coneixements globals sobre tot el sistema s'hauran d'estudiar les teories d'adsorció, les propietats del sistema, i així com les del AC i del LNG.

Fins al moment, les úniques dades proporcionades per l'empresa fabricant del AC (*Ingevity*) han sigut els ratios d'adsorció a 10 i 20°C de temperatura. És per això que l'objectiu d'aquest treball és simular el sistema a la temperatura real que es trobarà el LNG, al voltant de -162°C, i així poder tenir una estimació del rati d'adsorció a aquestes condicions.

També es consultaran diferents proveïdors de nitrogen líquid, mecanitzat d'alumini i components dels que està format el criòstat (vàlvules, canonades, manòmetres...) per tal d'avaluar un pressupost el més aproximat possible.

1.2.2. Metodologia

La metodologia emprada en aquest treball ha sigut primerament estudiar les diferents teories que expliquen l'adsorció, les seves característiques, variables i particularitats que impliquen aquest procés entre d'altres. S'investigarà sobre l'AC, i no només a nivell teòric en quant a propietats, fabricació i tractaments sinó a nivell pràctic revisant *papers* i estudis on s'hagi aplicat l'ús d'AC per tal de veure els seus resultats. També s'investigarà sobre l'ús del gas natural i la diferencia de les seves formes (LNG, ANG, CNG). A partir de les teories d'adsorció s'aproximarà un càlcul de la calor isostèrica. Per tal d'executar aquest càlcul també serà necessari la utilització de dades sobre la calor d'adsorció obtingudes del TFG de *Padullés Domínguez, Roger* [13]. També es farà una pinzellada termodinàmica sobre el criòstat i la seva composició en quant a resistència tèrmica.

Amb aquesta base teòrica s'afrontarà la simulació del model amb el software *Ansys Fluent*. No obstant, abans de recrear directament el model final es faran diverses simulacions amb altres models i condicions, per tal d'aprendre les diferents opcions del software i aquells paràmetres

que caldrà especificar per al sistema en qüestió. Entre tots els paràmetres que s'han de definir es farà una menció particular a les funcions, paràmetres imprescindibles, que s'han d'incloure al software per tal de recrear l'adsorció.

També hi ha hagut una feina de recerca per tal d'obtenir un pressupost aproximat sobre els components del *Criòstat*.

1.2.3 Requeriments Previs

Per a poder realitzar aquest treball han sigut necessaris coneixements d'enginyeria de fluids, termodinàmica i transferència de calor, en quant a coneixements teòrics. Aquests han ajudat a entendre els processos d'adsorció-desorció i les propietats del sistema, incloent les propietats del LNG i l'AC.

Pel que fa a nivell pràctic s'han utilitzat coneixements adquirits al llarg dels últims anys sobre *Solidworks* per tal de crear models per la simulació, tan 2D com 3D. És imprescindible un bon coneixement d'*Ansys Fluent*, així com de programació en C per tal d'incloure paràmetres al software. La manca de coneixements pràctics sobre el software (*Ansys*) i sobre el llenguatge de programació (C), tot i l'autoaprenentatge al llarg del transcurs del treball, clarament ha modificat i redefinit els objectius inicials, marcant així una línia de treball diferent.

CAPÍTOL 2: El Gas Natural i els seus sistemes

2.1. Introducció al Gas natural

El Gas Natural és una font d'energia fòssil composta per una barreja d'hidrocarburs. El seu poder calorífic pot variar molt segons la seva composició, però els més elevats es troben entre 8.500 i 10.200 kcal/m³. El seu principal component és el metà (CH_4), a més d'età (C_2H_6), propà (C_3H_8), butà (C_4H_{10}) o pentà (C_5H_{12}).

Bàsicament, és una font primària que es pot obtenir directament sense cap transformació. Es podria considerar l'energia primària més neta en quant a residus i emissions atmosfèriques. Comparat amb el dièsel o la gasolina, té beneficis mediambientals. Es veuen reduïts components com el Monòxid de Carboni (CO), el Diòxid de Carboni (CO_2), el Diòxid de Sofre (SO_2), el Diòxid de Nitrogen (NO_2) o les partícules PM, components directament relacionats amb la disminució de fum, pluja àcida i emissions d'efecte hivernacle. El GN també és més segur que la gasolina i el dièsel, ja que té una temperatura d'ignició superior, un rang d'octà superior i un rang d'inflamabilitat superior. És més lleuger que l'aire i per això causa dissipació.

2.2. LNG

El LNG és gas natural processat, emmagatzemat i transportat en forma líquida. El LNG és una forma de transportar el GN llargues distàncies, quan xarxes de subministrament a través de gasoductes són inviables, com a través d'oceans en vaixells o per terra en camions o tren. Els vaixells que transporten LNG s'anomenen *metaners*, i estan equipats amb tancs criogènics amb aïllants especials. Per aconseguir l'estat criogènic a la pressió d'una atmosfera, s'ha de refredar el GN fins a -162°C mitjançant una planta de reliqüefacció.



Figura 2.1. Exemple de metaner

L'LNG és incolor, inodor, no és tòxic i només pot donar-se combustió si entra en contacte amb l'aire en concentracions entre el 5 i 15%. La seva densitat variarà respecte l'estat en el que es

trobi, és més pesat que l'aire quan està en forma líquida i més lleuger quan està en estat gasós. Degut a la líquüfacció del GN, aquest es veu reduït en 600 cops el seu volum.

2.2.1.Composició i processament de LNG

La composició de LNG pot variar considerablement depenent el seu origen d'extracció. El component principal, fins a un 90%, és el metà (CH_4). L'età (C_2H_6) pot suposar fins un 12% i el propà (C_3H_8) fins un 3%. Altres components que significarien menys de l'1% són el butà (C_4H_{10}), l'isobutà ($i\text{-C}_4\text{H}_{10}$), el pentà (C_5H_{12}) o el nitrogen (N_2).

Worldwide average LNG compositions							
	Nitrogen	Methane	Ethane	Propane	Higher HC	Gross/High Heat Value	Wobbe Index
	%	%	%	%	C4 + %	MJ/Sm ³	MJ/Sm ³
Algeria-Arzew	0,56	87,98	9	1,99	0,47	41,68	52,62
Algeria-Bethioua 1	1,2	87,59	8,39	2,12	0,7	41,01	51,96
Algeria-Bethioua 2	0,92	91,39	7,17	0,52	0	39,78	51,41
Algeria-Skikda	1,02	91,19	7,02	0,66	0,11	39,87	51,42
Egypt-Damietta	0,08	97,7	1,8	0,22	0,2	38,39	51,03
Egypt-Idku	0	97,2	2,3	0,3	0,2	38,61	51,19
Libya	0,69	81,57	13,38	3,67	0,69	44,02	53,82
Nigeria	0,08	91,28	4,62	2,62	1,4	41,76	52,87
Abu Dhabi	0,29	84,77	13,22	1,63	0,09	42,45	53,16
Oman	0,35	87,89	7,27	2,92	1,57	42,73	53,27
Qatar	0,36	90,1	6,23	2,32	0,99	41,58	52,65
Trinidad	0,03	96,82	2,74	0,31	0,1	38,82	51,29
USA-Alaska	0,17	99,73	0,08	0,01	0	37,75	50,62
Australia-NWS	0,09	87,39	8,33	3,35	0,84	42,74	53,4
Brunei	0,05	90,61	4,97	2,89	1,48	42,09	53,06
Indonesia-Arun	0,06	91,16	6,01	1,84	0,93	41,32	52,64
Indonesia-Badak	0,02	89,76	5,06	3,54	1,62	42,61	53,34
Malaysia	0,16	91,15	4,96	2,79	0,94	41,52	52,7

Figura 2.2. Comparació de composicions de LNG segons el seu origen
Font: NGVA Europe Position Paper: LNG, a Sustainable Fuel for all Transport Modes
*Marcat en vermell la concentració més alta i més baixa de cada element

L'LNG ha de ser processat fins a obtenir el producte final necessari. Primer de tot es necessari eliminar alguns components del gas natural que s'extreu dels jaciments subterranis. Un element eliminat és l'aigua, ja que al refredar el gas es podria congelar o formar hidrats que bloquejarien el sistema al no poder-se eliminar fàcilment. El CO_2 també és eliminat ja que podria solidificar en condensacions per passar a fases líquides. El mercuri també és eliminat, ja que podria influenciar en els aparells de mesura i falsificar les lectures. Per últim, els hidrocarburs pesats o condensats es retiren perquè també poden veure's solidificats al estar sotmesos a temperatures baixes. Altres elements extrets directament dels jaciments, com propà (C_3H_8) o butà (C_4H_{10}), s'extrauen per elaborar altres tipus de combustibles com ara GLP (Gas Liquefied Petroleum). Finalment, amb la composició restant forma el LNG.

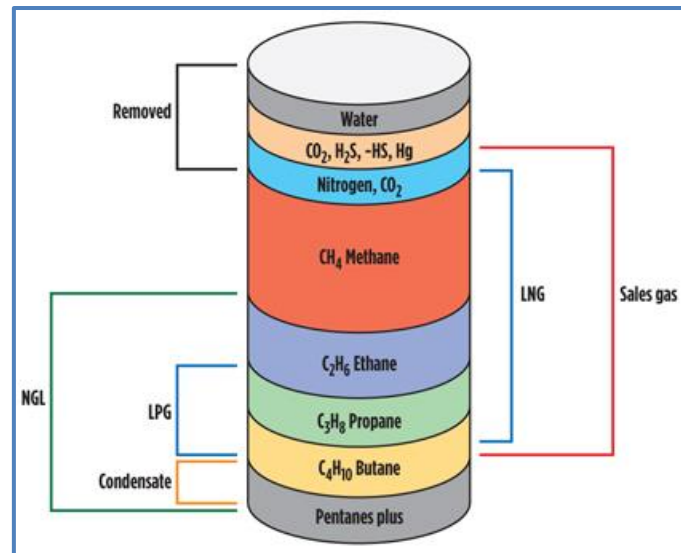


Figura 2.3. Representació components LNG a l'origen.

Font: www.gasprocessingnews.com

Article: Gas plant diversity united by economics, flexibility and proven design

2.3. Tipus de sistema (DUAL-FUEL)

Al projecte COLHD és vol implantar un sistema dual-fuel, que és capaç d'utilitzar dos tipus de combustibles alhora, en aquest cas dièsel i LNG. A diferència dels sistemes bi-fuel, els dual-fuel tenen la capacitat de barrejar els dos combustibles i per tant el sistema no ha d'escollir entre la utilització d'un dels dos. En general, el sistema és iniciat amb dièsel, ja que pren a una temperatura menor que el gas natural, i progressivament es va incorporant LNG fins a obtenir la barreja òptima. Però mai serà iniciat només amb LNG ja que el sistema necessita que dièsel incorpori temperatura fins a arribar al punt d'encesa del LNG. Aquesta fracció de dièsel s'anomena dièsel pilot.

2.4. Comparació NG, LNG, ANG i CNG.

La següent taula recull les principals diferències entre el gas natural i tres dels seus sistemes als quals pot ser transformat.

	NG	CNG	LNG	ANG
Tipus	Gas Natural	Gas Natural Comprimit	Gas Natural Liquefactive	Gas Natural Adsorbent
Pressió	1 bar	200-250 bar	10-25 bar	7-60 bar
Temperatura	T ambient	T ambient	-162°C	T ambient
Densitat d'energia (MJ/l)	0,036 MJ/l	7,35 MJ/l	21 MJ/l	4,2 MJ/l
% d'energia respecte 11 litres de gasolina (35 MJ/l)	0,1%	21%	60%	12%

Figura 2.4. Taula comparativa entre NG, CNG, LNG i ANG.

Degut a que els sistemes de CNG treballen a un rang de 200-250 bar, necessiten sistemes de pressurització, cosa que els encareix. Aquest cost pels sistemes de pressurització no s'observa als sistemes LNG, ja que no els necessiten degut al seu rang inferior de pressions. Per contra, el que els encareix és que tractin un material criogènic. Com a conseqüència, son imprescindibles els tancs amb un bon aïllament, per a evitar un ingrés de calor i un augment de la temperatura interior.

Els sistemes CNG se solen aplicar a transports *heavy-duty* però urbans, com busos, ja que es necessiten tancs de grans dimensions però tenen una infraestructura de subministrament creixent. Degut a l'alt rang de pressions de treball i a la baixa densitat d'energia, en comparació amb altres fuels líquids, es necessita un gran volum. El CNG també s'aplica a aquests tipus de vehicles ja que és més fàcil de produir i dispensar. Per contra, el LNG, tot i que té una gran autonomia, encara no té una bona i extensa infraestructura de subministrament. Degut a que per obtenir LNG s'ha de passar per un procés de compressió i refredament, la seva infraestructura es costosa i complicada. És per això que el LNG es sol aplicar a transports *heavy-duty* però de mercaderies de grans distàncies. Aquest és l'objectiu del projecte LNG Blue Corridors, establir el LNG com una alternativa real per al transport de mitjana i llarga distància, primer com a combustible complementari i posteriorment com a substitut adequat del gasoil. Per implementar una xarxa de transport sostenible per Europa, el projecte ha fixat l'objectiu de construir 14 noves estacions de LNG o L-CNG, tant permanents com mòbils, en llocs crítics al llarg de quatre passadissos que cobreixen l'àrea atlàntica, la regió mediterrània i la connexió. Europa de sud a nord i d'oest a est. Paral·lelament, el projecte construirà una flota de més de 150 vehicles resistents amb GNL. <http://lngbc.eu/>



Figura 2.5. Xarxa de Blue Corridors

Els sistemes ANG són els que tenen millors característiques d'emmagatzematge ja que s'estalvien treballar a rangs alts de pressió, comparant-ho amb els CNG. Respecte als LNG, s'estalvien problemes de líquüefacció, i al no tractar-se de materials criogènics, no tindran

problemes de *boil-off* ni necessitat de tancs amb un gran aïllament. Els sistemes d'ANG són els que tenen majors concentracions de GN i dependran directament de l'adsorbent, la gestió tèrmica durant el procés d'adsorció i aspectes estructurals del contenidor.

Pel que fa a la producció de contaminants, els sistemes CNG produeixen un 25% menys de CO₂ que la gasolina i 35% menys que el dièsel. El CO es veu reduït en un 95% i pràcticament no produeix sulfur. Respecte als sistemes ANG, vehicles dual-fuel amb ANG han reduït la producció de CO en un 75%, de NO_x en un 50% i de CO₂ en un 30%.

El *BOGRS* és un sistema d'ANG alimentat amb vapor de LNG. La diferencia principal respecte al ANG convencional és que en comptes de ser alimentat amb GN, es subministra el vapor provinent del *boil-off* del LNG, i per tant el rang de temperatures és molt inferior a la temperatura ambient habitual dels ANG.

CAPÍTOL 3: Carbó activat (AC)

3.1. Introducció

Entre tots els sòlids utilitzats a la indústria, el carbó activat és un dels sòlids més complexos però més versàtil degut a la seva extensa superfície i volum microporós. Degut a la seva distribució de mida bimodal (de vegades trimodal) proporciona un bon accés a les molècules al seu interior. L'estructura dels carbons activats és complexa i formada per una estructura amorfa i cristallina, semblant al grafit. Dels dos tipus d'estructures, la cristallina és important des del punt de vista de capacitat, ja que proporciona espais, com canals en forma d'escletxa, per acomodar molècules. És per aquest tipus de formes que a l'hora de parlar de mides de microporus, igual que a l'alúmina o gel de sílice es parla de radis, amb el carbó activat es parla de meitats d'amplades. L'estructura dels àtoms de carbó és similar a la del grafit pur. Les capes estan compostes per anells hexagonals regulars condensats i dues capes adjacents separades amb un espai de 0,335 nm. La distància entre dos àtoms de carboni adjacents en una mateixa capa és de 0,142 nm. Encara que la configuració bàsica és molt similar a la del grafit pur, hi ha algunes diferències, com l'espai entre capes des de 0,34 nm fins a 0,35 nm. A més, hi han defectes a la xarxa cristal·lina i la presència d'heteroàtoms, aquells que no siguin Carboni o Hidrogen. La *graphitic unit* del carbó activat sol estar composta d'aproximadament 6 o 7 capes i el diàmetre mitjà de cada unitat està sobre els 10 nm. La mida de la unitat pot augmentar sota l'acció de la grafitització i això sol produir-se a temperatures molt altes (>1000°C) i en una atmosfera inerta.

3.2. Antecedents

Els primers adsorbents que es van emprar van ser zeolites, però degut a que per limitacions estructurals la proporció d'àrea accessible al gas entre massa de vapor no era superior a 1000 m²/g, inclús en zeolites sintètiques. A més, les zeolites són extremadament hidrofíliques i poden perdre la seva capacitat d'emmagatzematge de metà envers l'adsorció d'humitat. En canvi, els carbons són els materials estudiats que major densitat d'energia tenen i que per tant, major capacitat d'emmagatzematge proporcionen.

Segons *Cracknell* i *coworkers* un material zeolític òptim és menys eficient per l'adsorció de metà que un material carbònic porós. Aquesta conclusió es basa en el seu resultat; que un porus en forma d'escletxa té major capacitat volumètrica d'emmagatzematge de metà que un porus en forma de cilindre o prisma hexagonal. I els materials carbònics estan modelats amb el primer tipus de porus i els zeolítics amb el segon.

Tots els altres materials que han estudiat per a substituir el carbó activat han de complir unes propietats tèrmiques que dificulten l'extracció posterior del gas natural, reduint la capacitat d'emmagatzematge de treball. Aquests altres adsorbents també són més cars que el carbó activat, inclús fins a deu cops més en algun cas. Per tant, la baixa capacitat d'emmagatzematge de treball i l'alt cost fa que no siguin viables.

3.3. Propietats del AC

Per predir la capacitat d'emmagatzematge d'un adsorbent és molt important tenir un coneixement tant qualitatiu com quantitatiu.

Algunes de les propietats que hauria de tenir un material adsorbent hauria de ser una alta densitat d'emmagatzematge, una baixa calor d'adsorció, una alta capacitat de calor, extremadament hidrofòbic, i una alta superfície d'adsorció entre d'altres.

3.3.1. Porositat

No tots els adsorbents són òptims per a tots els adsorbats. El metà no tindrà la mateixa capacitat d'emmagatzematge en qualsevol adsorbent, sinó que dependrà de les propietats d'aquest. És cert que uns dels objectius alhora de sintetitzar carbons activats és maximitzar la superfície d'adsorció. Però igual o encara més important és que la majoria dels porus que formen aquest adsorbent tinguin la mida desitjable en cada cas.

Segons la distribució de mida de porus (*PSD – Pore Size Distribution*), els materials porosos es poden classificar segons la mida dels seus porus.

Tipus	Mida [nm]	Mida [Å]
Microporosos	<2	<20
Mesoporosos	2-50	20-500
Macroporosos	>50	>500

Figura 3.1. Taula comparativa mida de porus

Per a tenir una bona adsorció de metà l'adsorbent ha d'estar format principalment per microporus (<20 Å) o mesoporus petits (entre 20 i 50 Å). La capacitat òptima d'emmagatzematge es donarà quan la fracció de volum d'emmagatzematge sigui màxima. No obstant, aquests porus pels quals està format han de ser d'una mida d'almenys 7,6 Å, és a dir, major que l'espessor de dos molècules de metà, per tal de maximitzar l'eficiència a l'hora de ser alliberades. Concretament, estudis afirmen que si només s'estudia el procés d'adsorció, el resultat és que l'adsorbent només hauria d'estar format per microporus, la mida i forma dels quals correspongui al emmagatzematge volumètric de dos molècules de metà ($\approx 7,6$ Å). En canvi, si es té en compte el lliurament, la desorció, la mida i forma òptima dels porus hauria de correspondre al emmagatzematge volumètric d'almenys tres ($\approx 11,4$ Å). Això asseguraria màxim lliurament, minimitzant la retenció de metà als microporus quan fos desorbit a pressió ambient, en el cas d'ANG. A més, l'espessor de la paret entre porus i porus hauria de correspondre a la mida d'una sola molècula d'adsorbent, fent així que tota molècula d'adsorbent tingui accés a les molècules d'adsorbat. La mesoporositat i la macroporositat haurien de ser minimitzades perquè aporten volum en forma de porus que no son emprats pel gas adsorbit o son molt ineficients. Aquests porus no ocupats contribueixen a la presència de gas comprimit i fan disminuir la densitat de l'adsorbent, fent ineficient la capacitat d'adsorció volumètrica.

3.3.2. Densitat d'empaquetament/emmagatzematge

A l'inici de l'estudi del ANG l'objectiu principal era augmentar la superfície o el volum dels microporus en base gravimètrica del seu adsorbent.

* La gravimetria consisteix en determinar la quantitat proporcionada per un element o compost en una mostra, eliminant totes les altres substàncies que interfereixin. És a dir, és un mètode analític mitjançant el qual es pot determinar la quantitat d'una substància mesurant el pes.

No obstant, es van observar casos on no sempre una alta superfície era el punt òptim, sinó que també es tenia que tenir en compte la densitat. Per això es va canviar de base gravimètrica a base volumètrica, on si que es contempla la dependència en la densitat.

En alguns casos es creu que no es possible maximitzar més les superfícies ja que s'han arribat als límits. És per això que el que s'intenta maximitzar també és la densitat d'emmagatzematge per tal d'augmentar la densitat d'energia de ANG, ja que el volum és una restricció. Els intents de maximitzar aquesta densitat d'emmagatzematge passen per augmentar la densitat global, optimitzar la mida de les partícules i inclús tractaments de calor o pressió sobre l'adsorbent.

Ja a l'any 1978 *Wennerberg i Grady*, de "Standard Oil Company", van patentar un procés d'activació de carbó per a sintetitzar carbons de superfícies relativament altes (fins 4057 m²/g). Els autors van demostrar que el que els hi diferenciava amb la resta va ser la seva habilitat de millorar la densitat global (fins 0,4 g/cm³) però mantenint altes superfícies. No obstant, l'única aplicació que es va dur a terme amb aquesta patent va ser amb aigua. Tot i així, càlculs realitzats a partir de dades d'aquesta patent indiquen grans àrees respecte base volumètrica (1310 m²/cm³) tenint en compte que cap dels millors adsorbents avui en dia han superat els 1450 m²/cm³.

Fins ara, les millores més significants en quant a la sinterització de grans àrees (en base volumètrica) han sigut a partir de precursors provinents de polímers. Degut això també ha sorgit la necessitat de millorar la densitat d'aquests precursors polimèrics.

3.3.3. Calor d'adsorció

L'adsorció és un procés exotèrmic i per tant es genera calor quan un sistema és carregat. En canvi, la desorció és un procés endotèrmic i quan un sistema es descarregat es necessita certa quantitat de calor. És per això que un material adsorbent amb baixa calor d'adsorció és preferible.

3.3.4. Capacitat calorífica

Depenent de la capacitat calorífica de l'adsorbent, les característiques de la transferència de calor del adsorbent i la fracció carregada o descarregada, es poden anticipar canvis en la temperatura d'adsorbent. Aquestes variacions de temperatura afecten directament la capacitat d'emmagatzematge de l'adsorbent. El problema general dels AC és que no tenen bona conductivitat tèrmica, i per tant els hi costa dissipar la calor. És per això que les majors

concentracions de NG es donen a les zones més fredes, a l'entrada i a les parets. I les menors concentracions es donen a les zones més càlides, al centre.

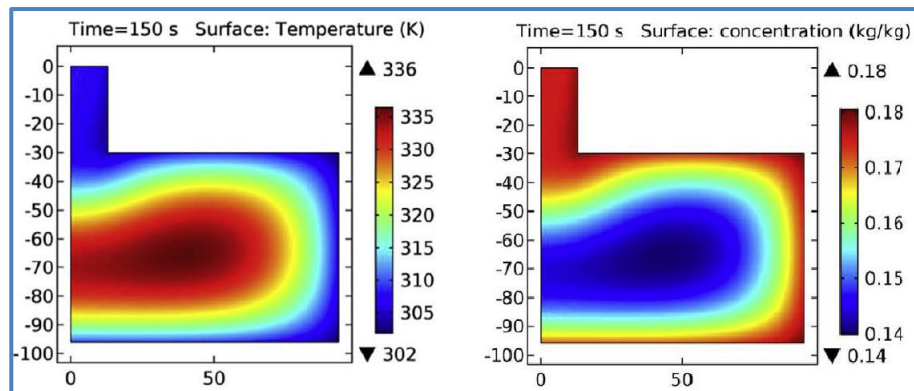


Figura 3.2. Representacions gràfiques comparant temperatures superficials i concentracions.

Cas: Geometria $L/D = 0,35$; temps de càrrega = 150s.

Font: [14] Patil, Kedar Haradas, i Satyabrata Sahoo

En el cas d'adsorcions adiabàtiques (on no s'intercanvia calor amb l'ambient) es poden donar augments considerables de temperatura en adsorbent amb una baixa capacitat calorífica. Això pot conduir directament a que la quantitat de metà adsorbida sigui menor a l'esperada. És per això que per ANG, i també pel nostre sistema, és preferible adsorbents amb altes capacitats calorífiques. És important que l'adsorbent estigui dotat d'una alta conductivitat tèrmica per així poder dissipar fàcilment la calor.

3.3.5. Temps de càrrega i descàrrega

La capacitat d'emmagatzematge no només depèn de la relació entre adsorbat i adsorbent, sinó que també s'ha de contemplar la duració de la càrrega o descàrrega de l'adsorbat.

Per tal d'exemplificar aquest temps es fa referència al paper de V. C. Menon i S. Komarneni [19] on es menciona el treball de Braslaw i companys, que indica que es disminueix en un 7% la capacitat d'emmagatzematge de metà quan el temps de càrrega passa de 3-4 hores a tan sols 1 hora. Les pressions de l'estudi oscil·len entre 75 i 250 psig i els temps de càrrega entre 3 i 60 minuts. Això va causar que el carbó activat arribés als 50 °C. En canvi, durant la descarrega es van arribar als -3 °C.

També es mencionen altres estudis, com el de Parkyns i Quinn, que assenyalen que una càrrega ràpida pot dur a una capacitat d'emmagatzematge del 90% del màxim sobre una càrrega lenta. Per donar una idea de les magnituds, per a una càrrega en 0,5 minuts es van arribar als 80 °C i per a una de 5 minuts 107 °C. En canvi per a una descarrega de pocs segons es va arribar a -30 °C però per a una de 120 segons es van arribar als -37 °C.

Per tant, segons els estudis mencionats anteriorment, per una banda si la càrrega es fa de forma ràpida la capacitat d'emmagatzematge pot veure's reduïda, cosa negativa. Però per altra banda, contra més ràpida es faci la càrrega i descarrega menor serà la variació de temperatura de l'adsorbat, cosa que facilitaria el procés. Extrapolant aquest fet al nostre sistema, això podria

indicar una reducció en la calor que cal extreure, en el cas de l'adsorció, o que cal donar, en el cas de la desorció. També cal tornar a destacar que aquests estudis estaven enfocats per ANG, a temperatura ambient, i que per tant en el nostre sistema es contemplarien altres rangs de temperatures, però amb comportaments similars.

3.3.6. Superfície química

La naturalesa química de la superfície dels carbons activats és encara més complexa que la xarxa de porus. Aquesta propietat depèn de diversos factors, com l'origen del carbó o com ha estat activat.

És un gran repte pel que fa a la sinterització d'adsorbents per a ANG, tenir mecanismes per poder modificar les propietats de la superfície. Per exemple, l'adsorció d'humitat és un dels principals reptes, especialment per a les zeolites. Hi ha estudis que demostren que substituint superfícies es poden millorar les qualitats hidrofòbiques. Com seria el cas dels gels de sílice, on es mantenen altes superfícies d'adsorció (fins $1200 \text{ m}^2/\text{cm}^3$) reemplaçant els grups de superfície d'hidròxid hidrofílic per grups hidrofòbics alcalins.

A diferència d'altres adsorbats comuns com nitrogen o diòxid de carboni, el metà no té ni moment dipol ni quadropol. El metà no mostra preferència per específics llocs. No obstant, s'han fet millores en la capacitat d'emmagatzematge del metà alterant la superfície química de carbons activats utilitzant agents halògens o sulfonats, o òxids de metalls de transició. Aplicant algunes d'aquestes tècniques *Greinke* i *coworkers* van augmentar un 21% la capacitat d'emmagatzematge de metà i un 12% la superfície d'adsorció, sobre l'AC Anderson AX-21.

3.3.7. Propietats mecàniques

L'adsorbent també ha de posseir unes propietats mecàniques com la duresa i tenacitat, és a dir, difícilment fràgil.

3.3.8. Guard bed

L'emmagatzematge de GN es pot veure reduït degut a l'adsorció d'espècies que no siguin metà, com humitat, hidrocarburs entre d'altres. Aquestes altres espècies no són eliminades de l'adsorbent durant les carregues ni les descàrregues. I és per això que es pot donar el cas que carrega rere carrega aquestes espècies tinguin més presència i que per tant la capacitat d'emmagatzematge es vegi reduïda constantment. Aquest efecte s'anomena taló (*heel*).

Un *guard bed* és un sistema selectiu a l'hora d'adsorbir components i en aquest cas pot ser dissenyat per tal d'adsorbir totes aquelles espècies que no siguin metà i així proporcionar metà pur al tanc principal.

3.4. Fabricació d'AC

Els processos de fabricació de carbó activat impliquen la preparació de materials, la carbonització a baixa temperatura i l'activació. Les condicions han d'estar controlades acuradament per aconseguir l'estructura de porus desitjada.

Les matèries primeres emprades per a la sinterització de carbó activat són matèries carbonoses com fusta, torba, carbons, coques* de petroli, ossos, closques de coco i fruits secs. L'antracita i l'hulla, carbons bituminosos, han estat les principals fonts. El fet que l'antracita és el carbó de més alt contingut en carboni, amb menors impureses i escassa, fa encarir el seu preu i substituir-la per l'hulla, més econòmica i amb propietats suficients.

*coques; plural de coc; sòlid carbonós derivat de les unitats de coquitació en una refinaria de petroli o d'altres processos de craqueig.



Figura 3.3. Antracita



Figura 3.4. Hulla

Precursor	Microporus	Mesoporus	Macroporus
Antracita	0,51	0,07	0,11
Hulla	0,43	0,17	0,26
Lignit	0,22	0,58	0,33

Figura 3.5. Comparació de la mida de porus (cm³/g) segons el precursor.

Font: Adsorbents Fundamentals and Applications

Autor (Any): R.T. Yang (2003)

A més dels porus inicials presents a la matèria primera, es creen de nous amb les distribucions de mida desitjades per l'anomenat procés d'activació. S'utilitzen dos mètodes d'activació estàndard: l'activació física i l'activació química.

Després del tractament inicial i la pel·letització, l'activació de gas implica primer la carbonització a 400-500 °C per eliminar la major part de la matèria volàtil. En aquesta carbonització del material en brut es creen residus de carboni. Però també es produeixen reaccions que inhibeixen el desenvolupament d'una estructura pregrafit. És per això que el carbó activat es denomina no grafitic. Ja que la carbonització no es suficient per desenvolupar una gran porositat, també s'ha

d'aplicar una gasificació u oxidació a 800-1000 °C. A la gasificació s'utilitzen gasos seus oxidants com el CO₂ o el gas de combustió perquè la velocitat intrínseca de la reacció superficial és molt més lenta que la difusió pel porus, i així es garanteix el desenvolupament uniforme dels porus al llarg del grànul. El carbó activat creat pel procés d'activació físic s'utilitza principalment per a processos d'adsorció de gasos i vapors. Tenint un acurat control, tant de la carbonització com de la fase de gasificació, es possible adaptar l'estructura de porus a aplicacions particulars, com l'obtenció de Mesoporositat (>30A) desitjable per a aplicacions de fase líquida, o mides de porus més petites(10-25A) necessàries per a aplicacions en fase gas.

L'altre procés d'activació, l'activació química, depèn de l'acció inorgànica d'additius per degradar i deshidratar els materials cel·lulòsics i, alhora per evitar la contracció durant la carbonització. En general, aquest procés s'utilitza per als precursors basats en lignina*, com ara serradures. Aquest procés d'activació no requereix de pre-carbonització. En general, la lignina és la matèria primera que es barreja amb activadors tals com a àcid fosfòric, clorur de zinc, sulfur de potassi o tiocianat de potassi, i es carbonitza a temperatures entre 500 i 900 °C. Els productes químics restants s'eliminen del carboni per l'àcid o pel rentat d'aigua. El producte final generalment és en forma de pols.

*Lignina; Polímer aromàtic natural de molècules ramificades, derivades principalment del fenilpropà, que forma part de la paret cel·lular de moltes cèl·lules vegetals, a les quals confereix duresa i resistència.

El contingut de material inorgànic en el carbó activat es mesura en quant a contingut de cendres, generalment en el rang entre el 2 i el 10%.

Els carbons activats es poden classificar segons la seva mida, mètodes de sinterització i aplicacions industrials. Tot i així, es poden diferenciar 4 tipus:

Carbó Activat Pulveritzat (PAC – Powdered Activated Carbon):

Està compost per partícules de menys de 1 mm i de diàmetre entre 0,15 i 0,25 mm, i presenten una gran relació entre superfície i volum. Els PAC es solen afegir a altres unitats de processos, com consums d'aigua, clarificadors i filtres de gravetat.

Carbó Activat Granulat (GAC - Granulated Activated Carbon):

Aquest tipus té una mida de partícula relativament més gran en comparació amb els PAC, i per tant una superfície externa més petita. Els GAC poden ser produïts en forma granular o extruïda, i són utilitzats per al tractament d'aigua, la desodorització i la separació de components de sistemes.

Pèl·let:

Es pot trobar en aquest format de pèl·lets, en forma de cilindres d'entre 0,8 i 5 mm. S'utilitzen especialment en gasos degut a que genera una menor caiguda de pressió que els FAC o PAC. També tenen una alta resistència mecànica.

Monòlit:

Aquestes estructures monolítiques es fan a partir de l'aglomeració de partícules d'AC. Es fabriquen mitjançant una premsa hidràulica i un motlle. La varietat que ofereix aquest

mecanisme de sinterització fa que cada fabricant pugui treballar unes propietats més que altres, destacant en el mercat amb característiques úniques.



Figura 3.6. PAC



Figura 3.7. GAC



Figura 3.8. Pel·lets



Figura 3.9. Monòlit

Per a l'aplicació en aquest projecte, el carbó activat hauria de tenir el major volum de porus en forma de microporus. En diferents estudis s'ha observat que en el procés d'activació, amb la fi de crear microporus, dóna un efecte secundari, l'evolució de macroporus. Això porta a un descens de la densitat d'emmagatzematge i un augment de la superfície respecte el pes. Per tant, una alta superfície però una baixa densitat entregarà menys metà que alguns carbons amb una baixa superfície però una alta densitat. Amb aquesta relació, com ja s'ha mencionat anteriorment, l'objectiu de maximitzar la superfície dels adsorbents està canviant de base gravimètrica a base volumètrica.

Vist des d'un punt de vista econòmic és cert que maximitzar la capacitat d'emmagatzematge dels carbons implica augmentar el cost d'aquests. És per això que ja s'ha començat a investigar la síntesis de carbons a partir de matèries més econòmiques o reciclades com paper de diari o pneumàtics vells.

3.4.1. Addició a la composició

La calor generada durant l'adsorció s'hauria de drenar cap a l'exterior del sistema per tal de maximitzar el seu emmagatzematge. Però la mala conductivitat tèrmica que solen tenir els AC pot dificultar aquesta extracció de calor.

S'ha comprovat que l'afegiment de pols de grafit fins a un 20% en massa al AC a la seva síntesi pot fer augmentar substancialment la conducció tèrmica del AC original. Però, aquest percentatge alt de grafit causa una reducció en el volum disponible per a l'adsorció. Articles com el de *Patil, Kedar Haradas, i Satyabrata Sahoo* [14] assenyalen que per a un 5% en massa de grafit es veu una reducció en el temps d'adsorció fins a la pressió de saturació. En aquests models amb pols de grafit l'eficiència d'emmagatzematge augmenta de 74 fins a 98% per a un cabal de 10 l/min.

Per a fluxos majors la incorporació d'aquest material no surt a compte. Això és degut a que l'augment de transferència de calor, degut a l'augment de la conductivitat tèrmica pel fet d'incorporar aquest material, es veu compensat amb la reducció en el temps d'ompliment pel major cabal d'entrada.

3.4. Carbó INGEVITY

El carbó emprat en aquest projecte es proveït per l'empresa estatunidenca *Ingevity*, especialistes en productes químics i materials de carbó. Els seus productes s'utilitzen en diverses aplicacions com podria ser paviments d'asfalt, exploració i producció de petroli, adhesius, lubricants o components d'automoció que redueixen les emissions de vapor de la gasolina, com seria el cas del seu carbó activat aplicat als cànisters. Produeixen carbons activats en forma granular, de panals o monòlits, els seleccionats en aquest sistema.



Figura 3.10. Logo d'Ingevity

Fins al moment, la única informació de les isoterms que Ingevity ha proporcionat és a 283 K i 293 K.

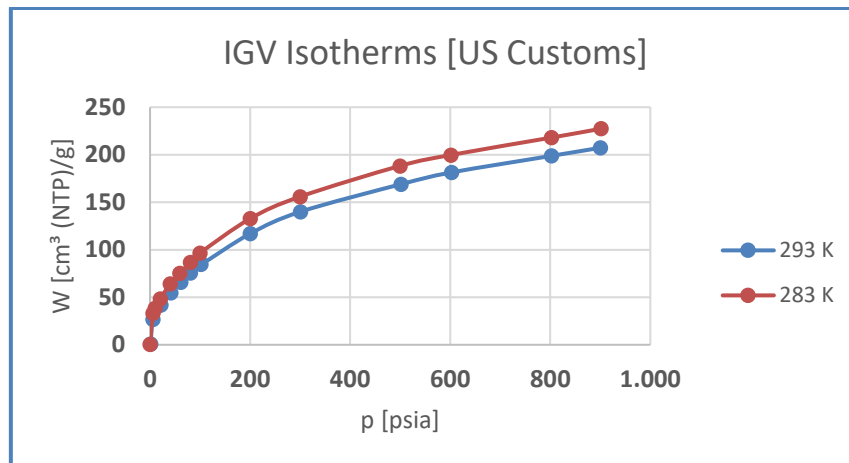


Figura 3.11. Isotermes INGEVITY amb la quantitat adsorbida en $\text{cm}^3(\text{NTP})/\text{g}$

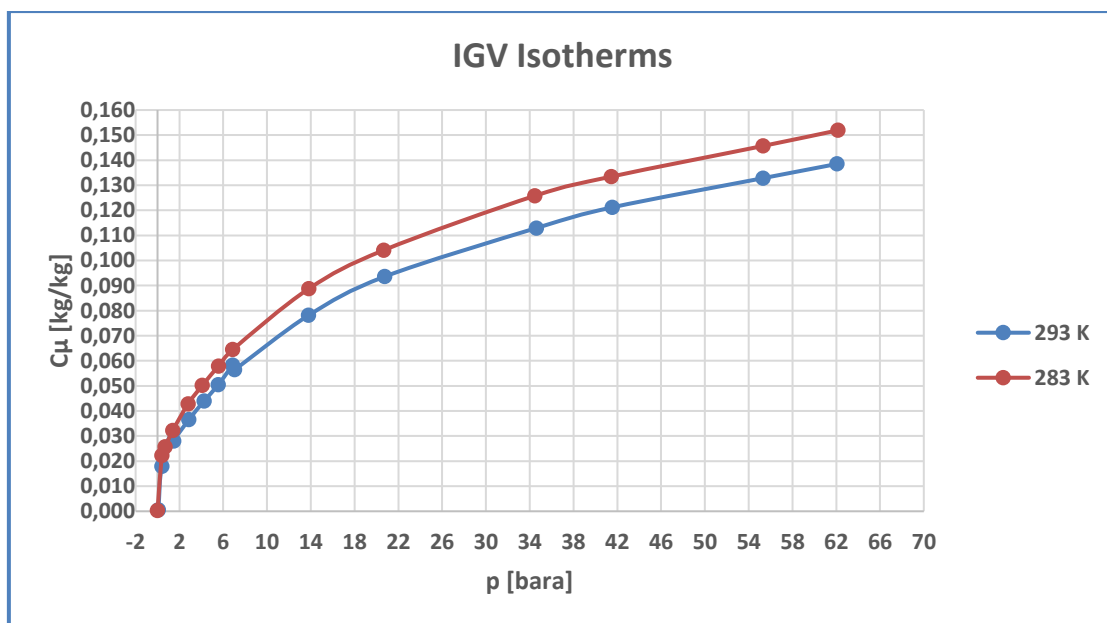


Figura 3.12. Isotermes INGEVITY amb la quantitat adsorbida en kg/kg

Amb aquestes isotermes, es va fer una aproximació per par de d'integrants del projecte. Si operéssim a 298 K a una pressió de 17,34 bar obtindríem unes concentracions de 0,096 kg/kg. Tenint en compte 5 ventilacions, s'obté que per a aproximadament 15 kg de vapor ventilat fan falta uns 170 kg de carbó activat.

Events	T [K]	p [bara]	C_μ [kg/kg]	BOG [kg]	Fuelsorb [kg]
1	283	17,34	0,096	3,345	34,84
2				3,231	33,66
3				3,130	32,60
4				3,020	31,46
5				2,913	30,34
				15,639	162,91

Figura 3.13. Taula aproximació kg AC

El passat mes de Novembre es van efectuar mesures per part d'*Applus Idiada* sobre 5 monòlits d'*Ingevity* que han proporcionat la següent informació:

Nº	ØMàx (mm)	ØMín (mm)	ØMitj (mm)	Lmàx (mm)	Lmín (mm)	Lmitj (mm)	Massa (g)	Volum (mm ³)	Densitat (g/mm ³)	Densitat (Kg/m ³)
1	188	187	187,5	115	113	114	1426,4	3147728,6	0,0004532	453,2
2	188	187	187,5	116	112	114	1435,2	3147728,6	0,0004559	455,9
3	188	186	187	117	112	114,5	1425,3	3144695,4	0,0004532	453,2
4	188	186	187	116	113	114,5	1436,3	3144695,4	0,0004567	456,7
5	187	186	186,5	116	112	114	1434,4	3114242,3	0,0004606	460,6

Figura 3.14. Mesures dels monòlits INGEVITY

CAPÍTOL 4: Característiques del procés d'adsorció – desorció

4.1. Introducció a l'adsorció

La sorció és un procés físic i químic pel qual una substància s'uneix a una altra, cadascuna provinents de fases separades. Segons com es produeixi es poden diferenciar dos tipus de sorcions:

Absorció: Es tracta de la incorporació d'una substància en un estat a un altre d'un estat diferent.

Adsorció: Es tracta de l'adherència física o l'adhesió de ions i molècules a la superfície d'una altra.

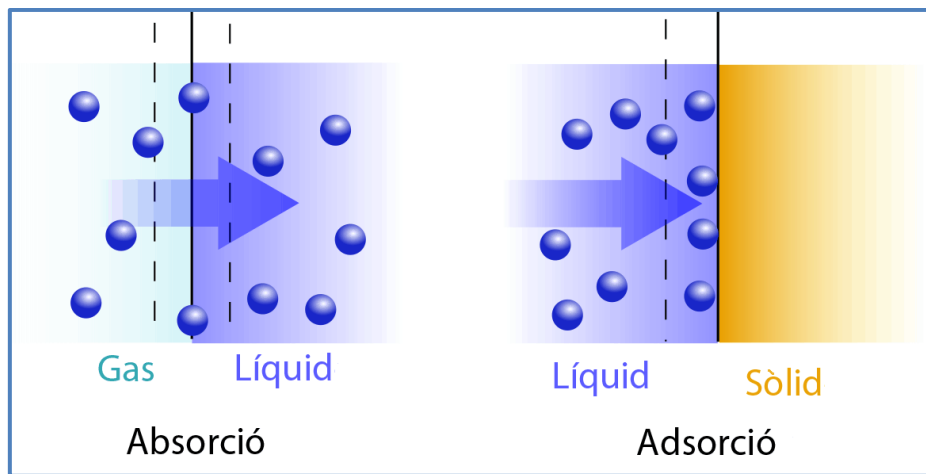


Figura 4.1. Absorció/Adsorció

La diferència principal és que amb l'absorció hi ha una transferència de massa i volum entre les dos fases, i per tant implica que la concentració d'adsorbat augmenta en la fase d'adsorbent. En canvi, a l'adsorció no hi ha una transferència de massa sinó que es tracta d'un fenomen superficial on l'adsorbat crea una capa superficial sobre l'adsorbent, i cada fase romà separada.

Tot procés de sorció sempre es dona entre una substància A (adsorbat) present en una fase fluida (líquid o gas) que queda adherit, en el cas de l'adsorció, a la superfície d'una substància B en fase sòlida (adsorbent). En aquest treball, l'adsorbent és l'AC i l'adsorbat el vapor de LNG, simplificat a CH_4 .

El procés d'adsorció no es pertanyent ni a l'adsorbat ni a l'adsorbent, sinó que depèn de la interacció d'ambdós.

El fenomen contrari a la sorció és la desorció.

4.2. Introducció a les teories

Dins de l'estudi del procés d'adsorció hi han diverses variables que contemplar per tal d'aplicar una o altra teoria. Depenent de si s'està analitzant el procés com a monocapa o multicapa, si l'adsorbat es tracta com un component pur o multicomponent, si se suposa una relació

homogènia o heterogènia entre adsorbat i adsorbent, conduirà a la utilització d'unes teories en concret i a descartar altres.

L'equilibri d'adsorció de components purs és essencial per entendre com un sòlid pot acomodar-los. La teoria bàsica en l'adsorció és la teoria de *Langmuir*, que explica l'adsorció sobre una superfície ideal en forma de monocapa. El terme "superfície ideal" fa referència a la periodicitat de la fluctuació d'energia a la seva superfície i a que la magnitud d'aquesta fluctuació és major que l'energia tèrmica d'una molècula. I per tant, les valls d'aquestes fluctuacions d'energia actuen com a vacants d'adsorció.

També existeix el principi termodinàmic de *Gibbs*, que tracta la fase d'adsorció com a una sola entitat i adapta la termodinàmica clàssica a aquesta fase. Gràcies a la seva adaptació, el concepte de volum va ser suplert pel d'àrea i el de pressió per pressió *spreading*. Assumint algunes formes de l'equació tèrmica d'estat relativa al nombre de mols d'adsorbat, l'àrea i la pressió *spreading*, i aplicant-ho al principi de *Gibbs*, es van poder derivar diverses equacions fonamentals.

Una altra teoria que explica el procés d'adsorció és la teoria de *Suwanayuen* i *Danner*, que soluciona el problema de les vacants de dos formes: una és fase gas i l'altra és fase adsorció. La diferència entre ambdues teories és la densitat. La solució que explica distingeix adsorbats i vacants. Les vacants són concebudes com entitats imaginàries que actuen com a espais a ser omplerts.

No només *Langmuir* parla d'una monocapa, sinó que *Nitta* i companys també van desenvolupar una teoria basada en la termodinàmica estàtica fent referència a aquest tipus de capes. Per a aquesta teoria, la teoria de *Langmuir* és un cas en concret. Bàsicament, assumeix l'adsorció en forma de monocapa amb la premissa que una molècula d'adsorbat pot ocupar més d'un lloc d'adsorció. La interacció entre molècules adsorbides està permesa en aquesta teoria. I com un cas en concret, quan el número de llocs d'adsorció ocupats per una molècula d'adsorbat es un, aquesta teoria es redueix a la de *Fowler-Guggenheim*. Però, sinó hi ha relació entre les molècules d'adsorbat, aquesta teoria es redueix a la de *Langmuir*.

Seguint amb teories que expliquen la formació d'una monocapa, *Freundlich* també defensa aquesta posició però introduint l'heterogeneïtat. Degut a que els sòlids són molt complexes, la relació entre aquests i l'adsorbat sol ser heterogènia. I l'evidència més clara d'heterogeneïtat és la disminució de la calor d'adsorció envers la càrrega d'adsorció.

Hi ha múltiples equacions empíriques com la de *Freundlich*, *Sips*, *Toth*, *Unilan*, *Keller* o *Dubinin* entre d'altres, però totes elles es basen en una adsorció en forma de monocapa. No obstant, a la realitat el procés d'adsorció no només forma una única capa sobre l'adsorbat. La primera teoria que es va desenvolupar tenint en compte un procés de multicapes és la teoria BET (*Brunauer*, *Emmett* i *Teller*). Segons aquesta teoria és cert que en l'adsorció primer es forma una única capa sobre l'adsorbent, però seguit d'aquesta, quan la pressió és suficientment alta, múltiples capes es formen sobre la primària. No obstant, tot i defensar la formació de multicapes, aquesta teoria manté la homogeneïtat de *Langmuir* a dins de cada capa formada.

Degut a la necessitat d'aplicació sobre uns tipus de sòlids en concret, també s'han elaborat teories enfocades a adsorbents microporosos, com seria l'AC. En aquest tipus de materials porosos el mecanisme d'adsorció es tracta com a emplenament de microporus. En aquests sòlids les parets dels microporus estan tant pròximes les unes de les altres que proporcionen una millora pel potencial d'adsorció. Aquest fort potencial és degut a forces dispersives. La teoria més famosa basada en aquestes forces és la teoria *Dubinin*, que alhora forma la base per a diverses equacions que descriuen l'equilibri en sòlids microporosos.

Degut a la dimensió comparable dels porus amb la de la molècula d'adsorbat, el mecanisme d'adsorció en microporus és completament diferent al d'adsorció en superfícies planes. En aquest segon cas les molècules ocupen longitudinalment una superfície plana. En canvi, en microporus el mecanisme és degut a aquests camps de força. Aquest major potencial d'adsorció crearà una major calor d'adsorció, comparant l'adsorció en microporus respecte en superfícies.

* Tots els autors citats en aquest apartat són extrets de *Do, Duong D.* [5]

4.3. Definició d'isoterma

Una isoterma és una funció que proporciona una sèrie de valors relacionats amb una mateixa temperatura. Aplicant aquest concepte a l'adsorció, una isoterma d'adsorció representa un conjunt de diferents condicions necessàries per a obtenir l'equilibri d'adsorció entra la superfície i el fluid. Com a resultat es pot obtenir una quantitat adsorbida a la superfície. Ja que l'adsorció depèn principalment de la temperatura i la pressió, considerant que la temperatura és constant, es pot obtenir una relació entre pressió i quantitat adsorbida. Aquesta relació és representada com a isoterma.

Depenent tant del adsorbat com del adsorbent, és a dir, de la seva interacció, les isoterms adoptaran diferents formes.

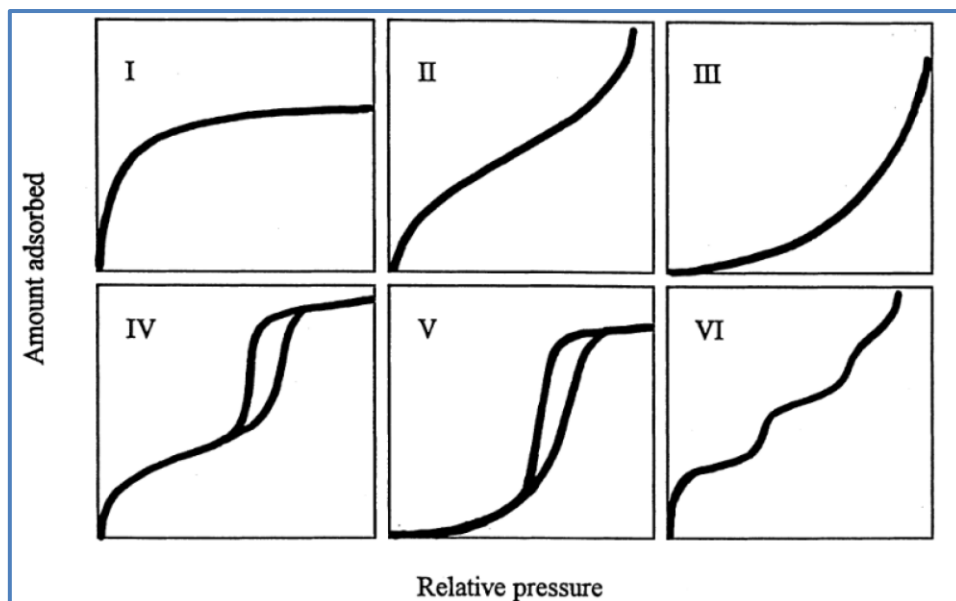


Figura 4.2. Tipus d'isoterms;
Font: Donohue & Aranovich, 1998)

Cada tipus d'isoterme són expressades per models que ajusten dades experimentals a aquestes gràfiques. *Freundlich* o *Langmuir*, descriuen la isoterma tipus I, mentre que BET descriuria la II.

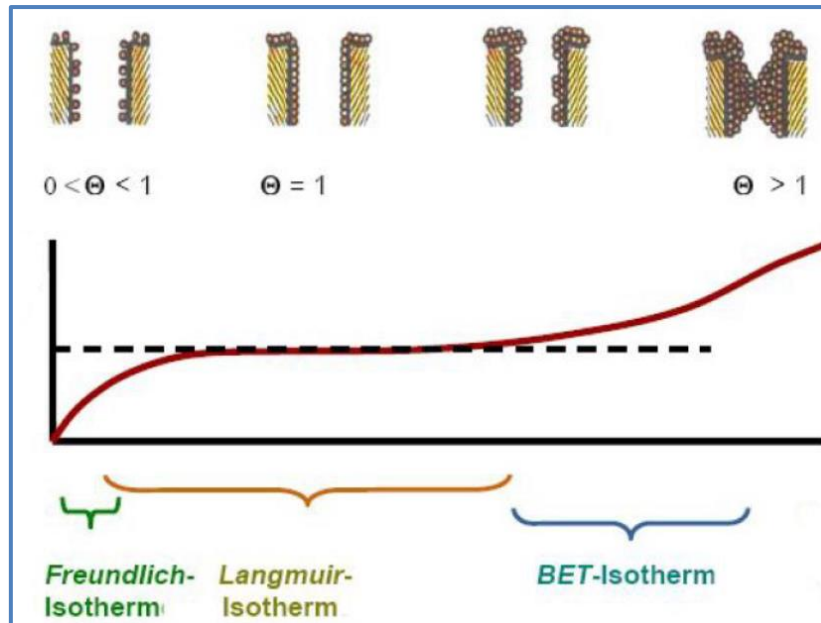


Figura 4.3. Tipus d'isoterma segons diferents teories

4.4. La llei d'Henry

La llei d'Henry és aquella que descriu la isoterma d'adsorció lineal, també anomenada isoterma d'adsorció d'Henry. Degut a que descriu la part lineal de la isoterma, aquesta es pot utilitzar per a descriure la part inicial de moltes altres isoterme. Normalment, es pren com a vàlida per a cobertes superficials baixes, i l'energia d'adsorció és independent de la cobertura, degut a la manca d'homogeneïtat a la superfície.

Aquesta és la isoterma d'adsorció més senzilla perquè la quantitat d'adsorbat superficial es proporcional a la pressió parcial del gas adsorbent. A partir d'aquesta llei s'extreu la constant d'adsorció d'Henry, i s'expressa de la següent forma:

$$X = K_H P \quad (4.1.)$$

X = cobertura superficial

K_H = Constant d'adsorció d'Henry

P = Pressió parcial

4.5. Adsorció en forma de monocapa

4.5.1. Langmuir

Una de les primeres teories més coherents d'adsorció és la teoria de *Langmuir*, que rep el nom del primer científic que la va proposar. Aquesta teoria es basa en un principi cinètic on la proporció que s'adsorbeix és igual a la que es desorbeix. Aquesta teoria explica el procés com un bombardeig continu de molècules sobre una superfície plana (adsorció) i posteriorment una evaporació d'aquestes molècules per a mantenir a zero la seva acumulació (desorció). Per tal de fer aquesta simplificació, aquesta teoria fa diferents hipòtesis:

- La superfície és homogènia i per tant l'energia d'adsorció és constant.
- L'adsorció a la superfície està localitzada. Cada molècula o àtom té un lloc definit i localitzat.
- Cada vacant només pot acomodar una molècula o àtom.

Aplicant aquestes hipòtesis s'expressa la definició de la isoterma de *Langmuir* en funció de la fracció adsorbida respecte el total de vacants. Si es relaciona aquest terme amb la pressió a la qual la superfície està sotmesa, s'obté l'equació de *Langmuir*:

$$\theta = \frac{Q k P}{1 + k P} \quad (4.2.)$$

θ = Adsorció

Q = Adsorció total equivalent a una monocapa adsorbida

k = Constant de *Langmuir*

P = Pressió

Expressat de forma lineal:

$$\frac{P}{\theta} = \frac{1}{Q} + \frac{1}{Q k} \cdot \frac{1}{P} \quad (4.3.)$$

4.5.2. Freundlich

El model de Freundlich es diferencia bàsicament de *Langmuir* en que assumeix que la superfície del adsorbent és energèticament heterogènia. Explica que la superfície està formada per diversos grups, els quals comparteixen energies i característiques iguals. Tampoc hi ha interaccions laterals entre les molècules adsorbides. No obstant, defensa la formació d'una monocapa, igual que *Langmuir*.

L'equació de *Freundlich* és molt utilitzada en la descripció de l'adsorció de materials orgànics, provinents de corrents aquoses, aplicats sobre carbó activat. També és aplicable en sistemes en fase gasosa que tenen superfícies heterogènies, sempre que no hi hagi un rang de pressió massa àmplia, ja que aquesta equació d'isoterma no segueix el comportament propi de la llei d'*Henry* a baixa pressió, i no té un límit finit quan la pressió és prou elevada. Per tant, generalment és vàlid, però en un estret rang de pressions.

$$C_{\mu} = K P^{1/n} \quad (4.4.)$$

C_{μ} = Concentració adsorbida

K = Dependent de la temperatura

n = Dependent de la temperatura

El paràmetre n normalment és major que 1, i contra major sigui, la isoterma d'adsorció es tornarà més no-linear, ja que el seu comportament divergirà cada cop més del comportament linear. Aquest comportament es mostra a la gràfica 4.4, on es mostra la quantitat adsorbida respecte la pressió parcial, seguint la isoterma de Freundlich, i variant el paràmetre "n".

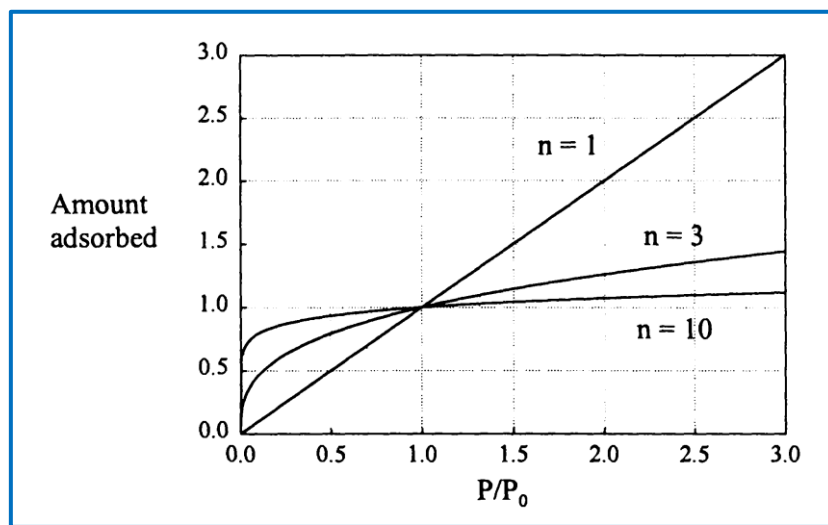


Figura 4.4. Isoterma de Freundlich variant el paràmetre "n"

4.5.3. Dubinin

Les teories de *Dubinin* s'alimenten de l'equació d'emplenament de microporus:

$$\theta = f(A / E, n) \quad (4.5.)$$

θ = fracció del volum microporós ocupat per l'adsorbat

f = funció de distribució de l'emplenament de microporus sobre el potencial d'adsorció (A)

A = potencial d'adsorció

E = energia característica (mesura de l'atracció entre l'adsorbat i adsorbent)

n = és el paràmetre associat amb la funció de distribució

On el potencial d'adsorció A es descriu amb unitats d'energia molar com:

$$A = R_g T \ln \left(\frac{P_0}{P} \right) \quad (4.6.)$$

4.5.3.1. Dubinin-Radushkevich (DR)

La distribució f a l'equació (4.5.) és arbitrària. *Dubinin* va escollir associar-li la distribució de *Weibull*:

$$f(A/E, n) = \exp [- (A/E)^n] \quad (4.7.)$$

Al paràmetre n se li va donar el valor de 2 per *Dubinin* i *Radushkevich*, creant així l'equació DR:

$$\theta = \exp [- (A/E)^2] \quad (4.8.)$$

Si s'observa, com que l'energia característica és independent de la temperatura, si es gràfica la fracció carregada enfront del potencial d'adsorció per a diferents temperatures, es col·lapsarà en una sola corba, anomenada corba característica. Aquesta característica de l'equació de *Dubinin* és molt útil en la descripció de dades a diferents temperatures. I es per això que s'adapta molt bé al processament de dades d'AC en general. No obstant, no funciona gaire bé amb estructures microporoses d'alguns AC o zeolites.

4.5.3.2. Dubinin-Astakhov (DA)

L'equació DR descriu bastant bé l'adsorció en sòlids carbònics. Però, quan el grau d'heterogeneïtat augmenta degut a la dispersió de mida de porus, aquesta teoria no és tan precisa. Per a solucionar aquest problema en superfícies heterogènies *Dubinin* i *Astakhov* (DA) van proposar la següent equació:

$$W = W_0 \exp [- (A/E)^n] \quad (4.9.)$$

On el paràmetre n descriu l'heterogeneïtat. Quan $n=2$ l'equació DA es redueix a l'equació DR. Reescrivint l'equació en termes de l'energia característica:

$$W = W_0 \exp [- (A/\beta E_0)^n] \quad (4.10)$$

4.6. Adsorció de multicapes

4.6.1. Teoria BET

Tot i les teories que expliquen el procés d'adsorció en forma de monocapa, a la realitat no és així, sinó que es formen diverses capes. A l'adsorció, les molècules primer s'adsorbeixen a la superfície formant una capa, i quan la pressió és suficientment alta (al voltant de 0,1 de la pressió relativa) diverses capes es formen sobre aquesta primària.] *Brunauer, Stephen, Emmet, P.H., i Teller, Edward* [7] van ser els primers en desenvolupar una teoria per aquestes multicapes

d'adsorció, la teoria BET, . El rang de validesa d'aquesta teoria és aproximadament entre 0,05 i 0,35 cops la pressió del vapor.

La teoria BET va ser desenvolupada inicialment per *Brunauer* per a una superfície plana, no corba, i no hi havia límit de nombre de capes que es podien formar, però gràcies a les aportacions de *Emmett* i *Teller* es va arribar a la teoria BET coneguda actualment.

En aquesta teoria s'aplica el principi cinètic que proposava *Langmuir* per a monocapes, però a un procés de formació de multicapes. Aquestes són les principals característiques:

- La superfície és energèticament homogènia, és a dir, l'energia d'adsorció no varia amb el progrés de l'adsorció dins d'una mateixa capa.
- La única interacció molecular és la que es dona entre una molècula d'una capa que actua única vacant d'adsorció per a una molècula d'una capa superior.
- La capa mes superior està en equilibri amb la fase gasosa. És per això que el rati d'adsorció en una capa és pràcticament igual al de desorció de la mateixa.
- La calor d'adsorció de cadascuna de les capes, a partir de la segona, és igual a la calor de líquüefacció.
- A la pressió de saturació, el nombre de capes tendeix a infinit.

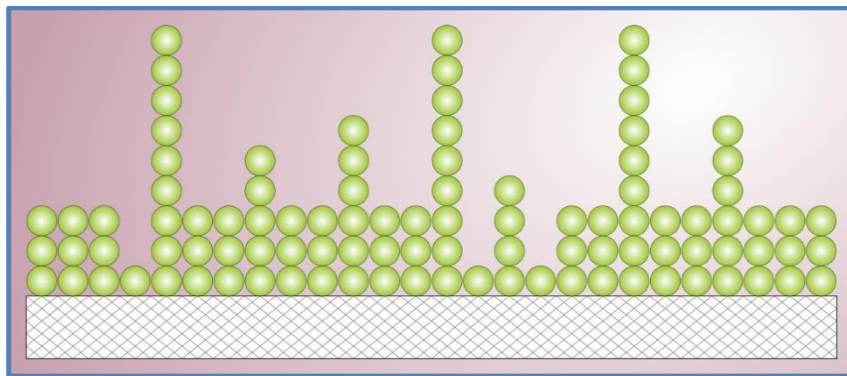


Figura 4.5. Representació d'adsorció en forma de multicapes segons el model BET

Tenint en compte que V_m és la cobertura de la monocapa, que ϵ_1 és la calor d'adsorció reduïda de la primera capa i ϵ_L és l'energia de líquüefacció

$$\epsilon_1 = \frac{E_1}{R_g T} \quad (4.11.)$$

$$\epsilon_L = \frac{E_L}{R_g T} \quad (4.12.)$$

i C és un paràmetre que relaciona exponencialment la diferència d'aquestes dues energies

$$y = \frac{a_1}{b_1} P \exp(\epsilon_1) \quad (4.13.)$$

$$x = \frac{P}{g} \exp(\epsilon_L) \quad (4.14.)$$

$$C = \frac{y}{x} = \frac{a_1 g}{b_1} \exp(\epsilon_1 - \epsilon_L) \quad (4.15.)$$

tenint en compte la pressió i el rati constant entre la segona i superiors capes (g),

$$\frac{b_2}{a_2} = \frac{b_3}{a_3} = \dots = \frac{b_i}{a_i} = g \quad (4.16.)$$

l'equació de BET seria:

$$\frac{V}{V_m} = \frac{C P}{(P_0 - P) [1 + (C - 1) \left(\frac{P}{P_0} \right)]} \quad (4.17.)$$

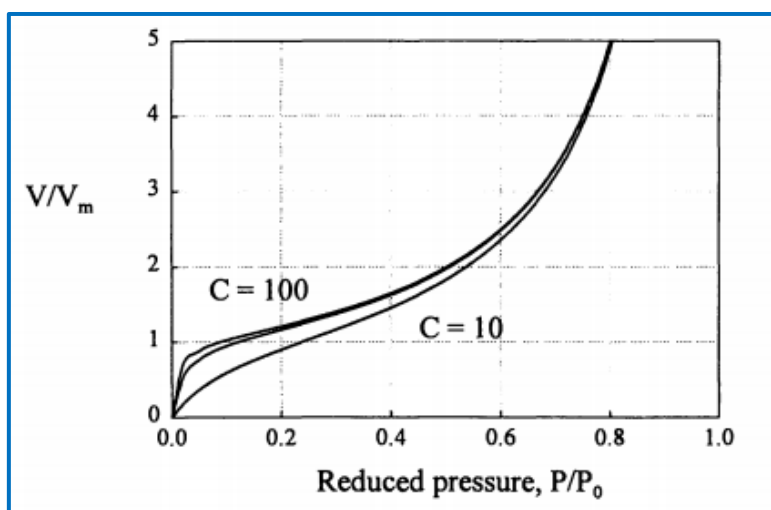


Figura 4.6. Isoterma BET

Aquest gràfic mostra l'equació BET respecte la pressió reduïda, essent C el paràmetre variable ($C=10, 50$ i 100). Contra més gran sigui C , abans augmentarà la convexitat de les isoterms i es formaran les multicapes respecte l'eix de pressions reduïdes.

Les isoterms dels gasos a temperatures no gaire lluny de les seves temperatures de condensació mostren dos regions per la majoria dels adsorbents: a baixes pressions les isoterms són còncaves però a altes pressions són convexes respecte l'eix de pressió.

Aquesta porció convexa a alta pressió ha estat interpretada de diferents formes. S'ha atribuït a la condensació als capil·lars del adsorbent al·legant que a capil·lars de dimensions moleculars la condensació pot tenir lloc a pressions molt més baixes que la pressió del vapor d'adsorbat. No obstant, altres mantenen que aquestes isoterms indiquen la formació de capes d'adsorció multimoleculars.

Contra més capes es formin més convexes seran les isoterms, tal com es mostra en el següent gràfic, per a "n" igual al nombre de capes.

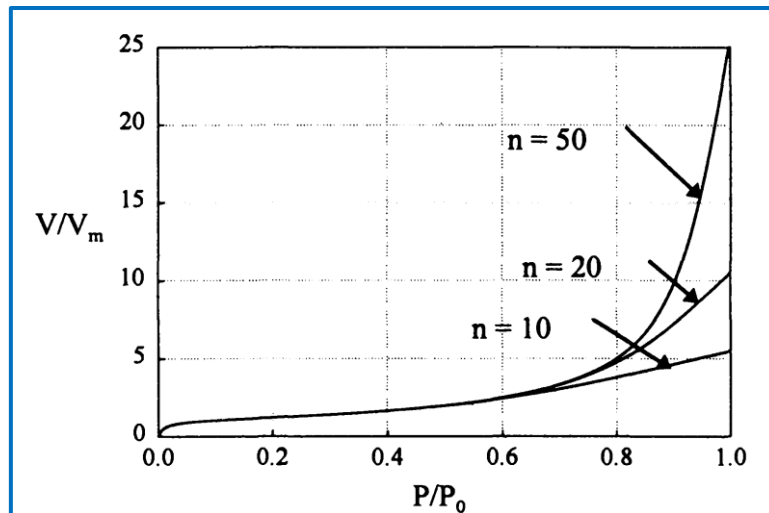


Figura 4.7. Isoterma BET variant el nombre de capes formades

Gràcies a la teoria BET es pot extreure l'equació:

$$P_0 = g \exp\left(-\frac{E_L}{R_g T}\right) \quad (4.18.)$$

Que comparant-la amb l'equació de *Clausius-Clapeyron*:

$$P_0 = \alpha \exp\left(-\frac{E_L}{R_g T}\right) \quad (4.19.)$$

S'observa que el paràmetre g és el factor pre-exponencial en l'equació de la pressió de vapor de *Clausius-Clapeyron*. Com que el paràmetre g és el rati de la taxa constant d'adsorció-desorció de la segona i superior capes, es dedueix que aquestes capes condensen i evaporen de forma similar a la fase líquida.

Tot i que la teoria BET és molt utilitzada, també té punts febles o punts a discutir. El primer és que les superfícies de sòlids reals són heterogènies, mentre que el model assumeix que els llocs d'adsorció són energèticament idèntics. La segona raó és la suposició de la força vertical entre les molècules d'adsorbent i adsorbat. Aquesta suposició no té en compte la interacció horitzontal entre molècules adsorbides. La tercera raó va ser proposada per *Halsey* i afirma que per a qualsevol valor de C l'adsorció sempre estarà confinada només en la primera capa fins que s'arribi a la pressió de condensació.

4.6.1.1. Formació de la multicapa

La teoria BET també s'alimenta de diverses teories. Per una part utilitza la teoria de polarització de *DeBoer* i *Zwicker* per explicar la formació de la primera capa. Els seus autors expliquen l'adsorció de molècules no polars, com seria el CH_4 , en adsorbents iònics. Assumeixen que la capa més superficial d'adsorbent indueix dipòls, camps creats entre dos carregues puntuals d'igual magnitud però de signes oposats, a la primera capa de molècules adsorbides. D'altra banda, les forces responsables de la formació de la segona i posterior capes són les forces de *Van der Waals*.

Les molècules apolars o no polars són aquelles molècules que es formen per la unió d'àtoms d'igual electronegativitat, i que per tant les forces amb les que els àtoms que conformen la molècula atrauen els electrons del enllaç són iguals. En canvi, una molècula és polar quan un dels seus extrems està carregat positivament i l'altre negativament. Quan la molècula és apolar aquestes càrregues no existeixen. En el cas del metà (CH_4) es tracta d'una molècula covalent formada per àtoms d'electronegativitat semblant.

4.7. Calor isostèrica

En l'estudi del procés d'adsorció-desorció la calor isostèrica és un paràmetre molt important a tenir en comte ja que ens mostra la relació entre el canvi infinitesimal en l'entalpia d'adsorbat i de la quantitat adsorbida. Aquesta informació sobre la calor alliberada és molt important ja que quan aquesta s'allibera degut al procés d'adsorció, l'energia alliberada és adsorbida en certa part per l'adsorbent sòlid i també dissipada al entorn. La proporció que és absorbida pel sòlid fa que augmenti la temperatura de les seves partícules, i amb aquest augment de la seva temperatura alenteix la cinètica d'adsorció, ja que l'adsorció de massa està directament relacionada amb la velocitat de refredament de la partícula. El fet que les partícules d'AC augmentin de temperatura a mesura que avança el procés d'adsorció és completament desfavorable per aquest.

4.7.1. Calor d'adsorció

Per tal de calcular la calor isostèrica, primer es necessari saber la calor que incorpora el vapor de LNG a l'entrar al sistema. Per calcular aquesta calor es recorre al TFG de *Padullés Domínguez, Roger* [13]. En aquest treball es contempen diverses localitzacions per estudiar el *boil-off* del tanc d'emmagatzematge, des de zones gèlides com Göteborg al hivern, passant per zones més estables com Barcelona i fins extrems càlids com podria ser Sevilla a l'estiu. Per agafar les dades s'ha seleccionat l'escenari i temporada més desfavorable, la localització de Sevilla al Juliol, i la major ventilació, la primera. En aquell treball es van calcular dos hipòtesis, una on el nivell de combustible al tanc era del 70% i una altre on el nivell era del 30%. Per fer el càlcul s'ha escollit la hipòtesis del 70% ja que és la més desfavorable, és on més s'ha de ventilar. La massa a ventilar és de 3,24 kg ($m_{\text{ventilada}}$).

La ventilació del vapor al tanc en duu a terme gràcies a una vàlvula de seguretat, *Cryogenic Safety Relief Valve*, instal·lada a la part superior del tanc. Aquesta està tarada a una pressió 17 bar (absoluta). Quan la pressió del dipòsit sobrepassa un 2% d'aquesta pressió llindar (17,34 bar) la vàlvula s'obre. En canvi, quan la pressió del tanc es redueix fins a un 92% (15,64 bar) la vàlvula es tanca. La vàlvula de ventilació instal·lada opera a un cabal de 473 kg/h.

Aquestes són les propietats del metà en equilibri:

1. A la pressió d'obertura de la vàlvula (17,34 bar)
2. A la pressió mitja de ventilació (16,49 bar)
3. A la pressió de tancament de la vàlvula (15,64 bar)

	Pressure (bar)	Temperature (K)	Liquid Density (kg/m³)	Vapor Density (kg/m³)	Liquid Enthalpy (kJ/kg)	Vapor Enthalpy (kJ/kg)	Liquid Entropy (kJ/kg-K)	Vapor Entropy (kJ/kg-K)
1	17,340	162,15	331,19	27,843	194,36	556,61	1,3945	3,6285
2	16,490	160,88	334,25	26,361	188,68	556,92	1,3609	3,6499
3	15,640	159,56	337,34	24,902	182,86	557,12	1,3262	3,6718

Figura 4.8. Propietats del metà en equilibri a diverses pressions

Es calcula l'entalpia mitja, entre la pressió d'obertura i de tancament, del vapor que s'eliminarà del tanc, és a dir, del vapor que s'introduirà al Criòstat.

$$h_{vap\ mitja} = \frac{h_{(17,34)} + h_{(15,64)}}{2} = 556,675\ kJ/kg \quad (4.20.)$$

$$H = h_{vap\ mitja} m_{ventilada} = 1.803,627\ kJ \quad (4.21.)$$

Tot i que aquesta serà la primera de diverses ventilacions, aquestes dades seran les utilitzades, ja que la primera ventilació serà la major de totes. I per tant, adequant el sistema a aquesta, les posteriors també seran viables.

Les propietats del vapor de LNG s'aproximaran a la pressió mitja del procés de ventilació.

$$P=16,49\ bar$$

$$T=160,87\ K$$

4.7.2. Càlcul de la calor isostèrica aplicant *Langmuir*

La teoria de *Langmuir*, com a una de les primeres teories d'adsorció, també explica la calor isostèrica. Aplicant aquesta teoria es deriva fins la següent equació:

$$-\Delta H = Q + \frac{\delta R T^2}{1-\theta} \quad (4.22.)$$

Q = Calor d'adsorció [J]

T = Temperatura a la que es dona el procés [K]

R = Constant dels gasos ideals [J/kmol]

θ = Fracció carregada o quantitat adsorbida

δ = Coeficient d'expansió tèrmica

On el negatiu indica que el procés és exotèrmic.

L'expansió tèrmica és la tendència de la matèria a canviar en forma, àrea i volum en resposta a una variació de temperatura. Es tracta d'un fenomen reversible, ja que al recuperar la temperatura inicial es recuperen també les condicions inicials. La temperatura és una funció monòtona de l'energia cinètica d'una substància. Quan una substància s'escalfa, l'energia cinètica de les seves molècules augmenta. I com a conseqüència, les molècules comencen a

vibrar i moure's. Com a resultat, normalment els sòlids tendeixen a dilatar-se i els materials en estat gasos a expandir-se.

Coefficient d'expansió a les condicions de pressió

	Temperature (K)	Pressure (bar)	Liquid Density (kg/m³)	Vapor Density (kg/m³)	Liquid Enthalpy (kJ/kg)	Vapor Enthalpy (kJ/kg)	Liquid Entropy (kJ/kg-K)	Vapor Entropy (kJ/kg-K)	Liquid Isothermal Expansion	Vapor Isothermal Expansion
1	160,87	16,483	334,27	26,350	188,64	556,93	1,3607	3,6501	52,940	0,68042

Figura 4.9. Coeficient d'expansió

La quantitat carregada (θ) es tracta de la fracció adsorbida al sistema respecte el total. Teòricament, quan s'inicia la càrrega θ és 0 i quan aquesta s'acabés θ seria 1, ja que s'hauria arribat a la concentració saturada màxima, és a dir:

$$\theta = \frac{C_{\mu}}{C_{\mu, \text{st}}} = \frac{C_{\mu, \text{st}}}{C_{\mu, \text{st}}} = 1 \quad (4.23.)$$

No obstant, aquest és un límit teòric ja que sempre s'aturarà abans d'arribar a 1 degut a que el procés d'adsorció s'aturarà per altres motius i no arribarà a assolir la concentració màxima de saturació.

Aplicant aquesta formulació:

$$Q = 1.230,5412 \text{ e}+03 \text{ J}$$

$$T = 160,87 \text{ K}$$

$$R = 8,314472 \text{ J/kmol}$$

$$\theta = 0 \dots 1 *$$

$$\delta = 0,68042$$

*La fracció carregada oscil·la entre 0 i 1 segons en quin punt de la càrrega es trobi.

La calor isostèrica s'avalua i es mostra a la Figura 4.10. La quantitat adsorbida però, no s'avalua a 1 ja que s'obtindria una indeterminació.

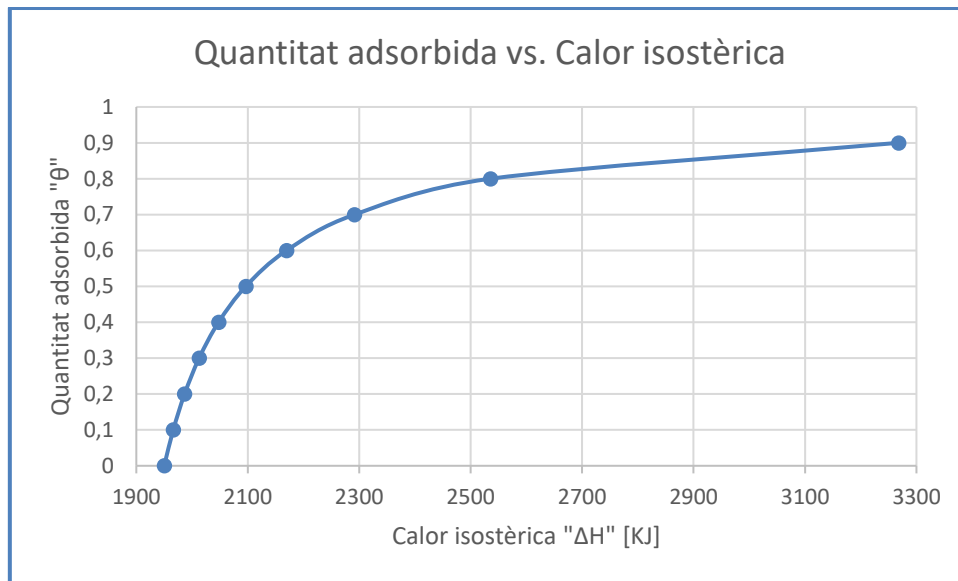


Figura 4.10. Quantitat adsorbida vs. Calor isostèrica

Tot i obtenir un valor màxim de 3.267,6 kJ per a una quantitat adsorbida de 0,9, en la majoria de casos el rati de quantitat adsorbida " θ " no supera els valors de 0,3-0,4.

Aquesta teoria és una bona primera aproximació, però cal aclarir que a la realitat la superfície és molt més complexa que una simple placa plana i una adsorció en forma de monocapa.

CAPÍTOL 5: El Criòstat

5.1. Explicació del Criòstat

El Criòstat és el sistema a través del qual el vapor d'LNG provinent del dipòsit s'adsorbeix per l'AC, i posteriorment es desorbit. El Criòstat està format per un cilindre buit d'alumini anomenat *Internal Body (IB)*, tancat per la part superior i inferior per dos tapes. A l'interior del IB s'emmagatzemarà el monòlit d'AC o en el cas de necessitar més d'un monòlit es contempla l'opció de crear una estructura impresa per una impressora 3D per tal de mantenir els monòlits subjectats. A dins de la paret del IB hi ha un serpentí de dalt a baix que forma el bescanviador de calor. Aquest passa de costat a costat del IB, en forma de dos meitats, diferenciant així dos serpentins completament simètrics. És per això que l'entrada del LN2 es veu bifurcada.

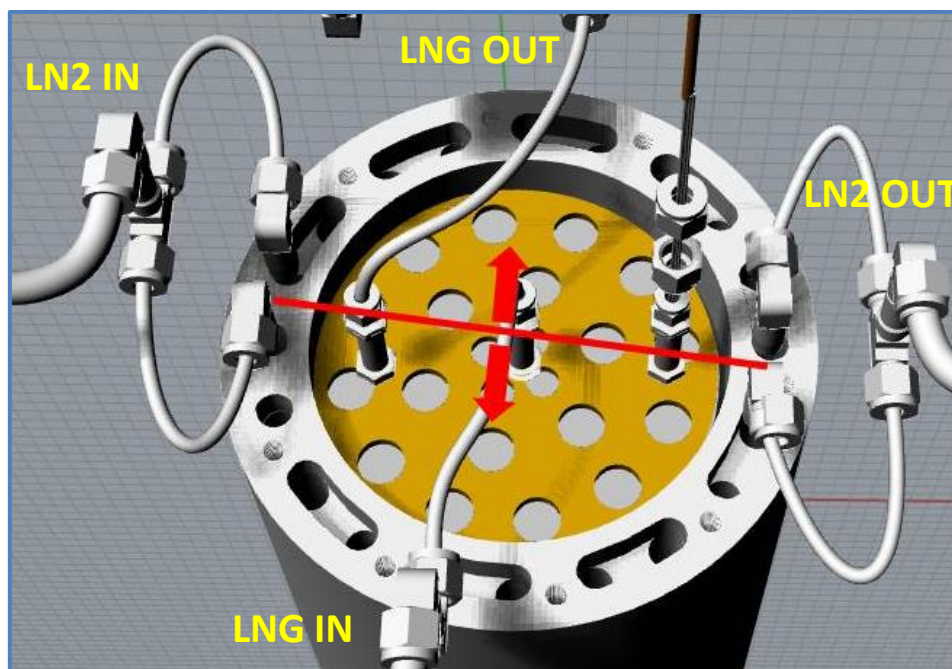


Figura 5.1. IN i OUT del Criòstat

5.2. Bescanviador

Com a resultat de l'adsorció del vapor de LNG per part del AC, aquest augmentarà de temperatura. Aquesta conseqüència és totalment inapropiada, ja que contra més sigui la temperatura del AC, menys serà la seva capacitat d'adsorció. És a dir, disminuint la seva temperatura s'aconseguirà augmentar l'adsorció del sistema. És per això, que per tal d'afavorir el procés d'adsorció, ja que es tracta d'un procés exotèrmic, es farà passar pel serpentí LN2, provocant així un alliberament de calor. En canvi, com a resultat de la desorció, el carbó disminueix la seva temperatura. Aquest fet provoca que disminueixi la seva capacitat de desorció. Per tant, per afavorir la desorció, ja que es tracta d'un procés endotèrmic, es farà passar aire o aigua calenta pels tubs, provocant així un ingrés de calor.

El bescanviador també serà una eina imprescindible que permetrà fer assajos a diferents temperatures, variant el cabal o propietats del fluid que es faci passar per l'entramat.

També és important la retirada de calor durant l'adsorció, o l'ingrés durant la desorció, ja que sinó es podria donar el cas en el que es donés la desorció instantàniament just després de l'adsorció. És a dir, en el cas que l'adsorció provoqués un augment molt fort de temperatura podria invertir el procés i provocar una desorció natural com a conseqüència. Per això el bescanviador és imprescindible, per tal de mantenir estables les condicions.

El serpentí tindrà dues entrades a la part superior i envoltarà el cilindre formant dues meitats totalment simètriques. A cada meitat, el fluid passarà 10 cops des de la part superior fins a la base.

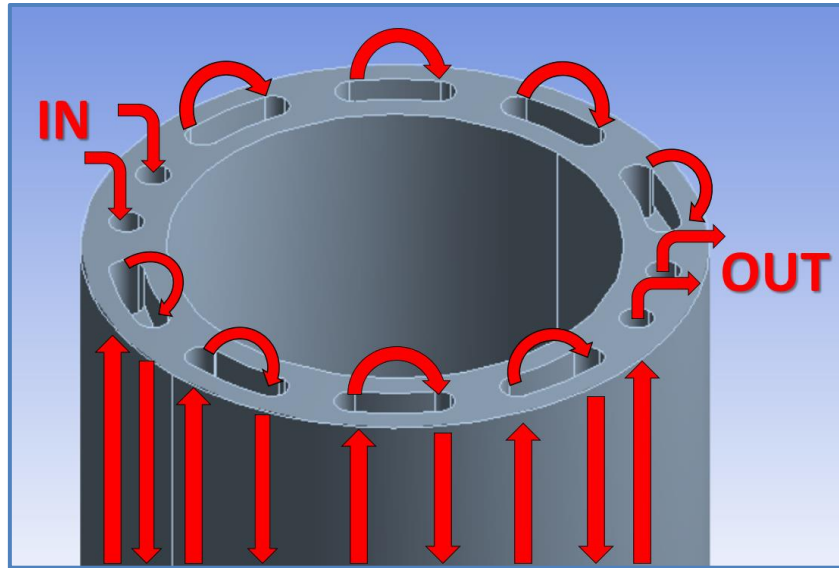


Figura 5.2. IN i OUT del LN2 (Vista frontal)

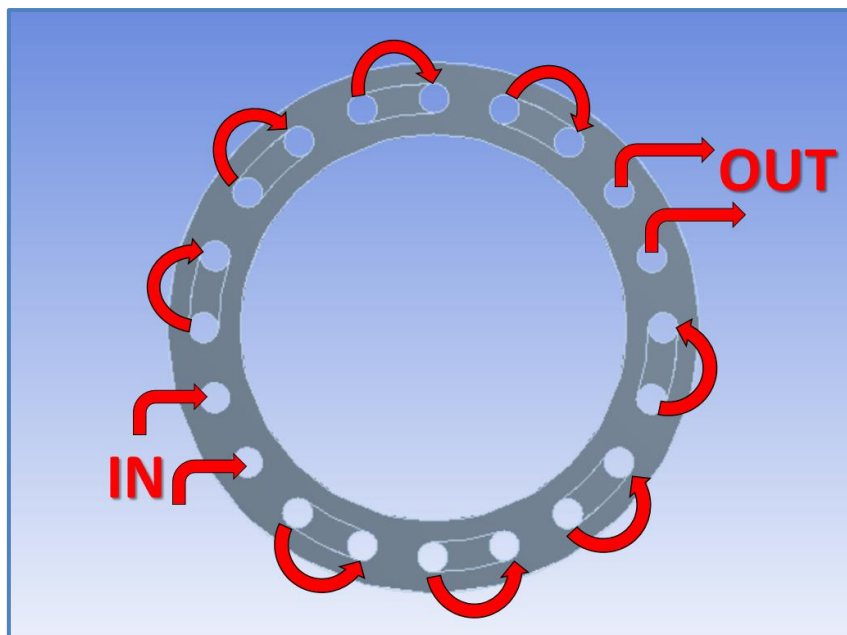


Figura 5.3. IN i OUT del LN2 (Vista superior)

Per a dur a terme el càlcul de la calor extreta pel bescanviador s'haurien de fer diverses hipòtesis:

- El funcionament del sistema es trobaria en regim estacionari, amb condicions estables.
- El intercanviador de calor estaria completament aïllat i per tant la pèrdua de calor al ambient no es considera.
- Les pèrdues d'energies cinètiques i potencials de les corrents dels fluids son menyspreables.
- No es té en compte la incrustació.
- Les propietats dels fluids son constants a la primera fase.

La potència calorífica es pot expressar com:

$$\dot{Q} = \dot{m} (h_s - h_e) \quad (5.1.)$$

On h_e es pot calcular sabent que la pressió d'entrada és de 1,5 bar a una temperatura de 80,8 K, com es mostra a la *Figura 5.4*. La massa es podria calcular amb el cabal màssic i el temps del flux, i la h_s un cop la simulació fos calculada, amb les propietats de temperatura i pressió de la sortida.

	Temperature (K)	Pressure (MPa)	Liquid Density (kg/m³)	Vapor Density (kg/m³)	Liquid Enthalpy (kJ/kg)	Vapor Enthalpy (kJ/kg)	Liquid Entropy (kJ/kg-K)	Vapor Entropy (kJ/kg-K)
1	80,800	0,14928	790,21	6,5993	-114,92	79,658	2,9232	5,3313

*Figura 5.4. Taula de propietats del LN2 a 80,8K;
Font: REFPROP-NIST*

Degut a l'estat criogènic del nitrogen, la primera tendència que tindrà serà passar a estat gasós per l'absorció de calor. És per això que es va contemplar l'opció d'instal·lar un compressor i un condensador a la sortida del serpentí, per tal d'aprofitar el nitrogen. No obstant, per motius de disseny i econòmics s'ha optat per no fer-ho així i utilitzar-lo només d'una passada.

5.3.1 Nitrogen Líquid

El Nitrogen líquid serà proporcionat en recipients tipus *Dewar*, dissenyats per a proporcionar aïllament tèrmic i disminuir les pèrdues de calor per conducció, convecció o radiació. El nitrogen líquid ha sigut escollit per davant d'altres materials criogènics com l'Heli líquid ja que té una calor d'evaporació 60 cops i costa 20 cops menys.



Figura 5.5. Exemple de Dewar

5.2. Semblança amb ANG i condicionants

En l'estudi del procés d'adsorció-desorció d'aquest sistema és imprescindible i fonamental entendre com funciona i les propietats entre l'adsorbat i l'adsorbent. És important destacar que un cop el vapor de LNG s'introdueix dins el Criòstat aquest sistema es pot equiparar a un sistema d'ANG amb les diferències en quant a pressió i temperatura. En un sistema ANG es treballa entre 7 i 60 bars i a una temperatura ambient. En canvi, en el nostre sistema de recuperació es treballarà al voltant dels 16 bars i 161 K. No obstant, el comportament del ANG i les seves propietats són extrapolables al nostre sistema, sempre tenint en comte aquesta diferència de temperatura i pressió que repercutirà en la quantitat adsorbida.

En un sistema d'ANG les principals variats que poden influenciar més en el comportament del sistema es poden dividir en tres. Les propietats del flux d'entrada, la geometria del sistema i les condicions de contorn, com tipus de convecció, paret adiabàtica, temperatura constant de la paret entre d'altres.

Depenent de quin sigui el cabal d'entrada repercutirà en el temps de càrrega del sistema. Amb majors cabals d'entrada, és a dir, amb menors temps de càrrega, s'aconsegueix saturar abans però per contra l'eficiència d'emmagatzematge també disminueix. En contra, els sistemes més lents de càrrega mostren una alta eficiència d'emmagatzematge. I aquests alts temps de càrrega també es veuen en els casos on hi ha convecció forçada. Igual que la càrrega de gas està directament lligat a l'extracció de calor, les majors eficiències estan lligades a l'àrea exposada a l'ambient, on es pugui donar convecció. La convecció és la condició de contorn que té més

repercussió sobre el sistema. Igual que la convecció natural actua de forma molt similar a una paret adiabàtica, aconseguint els majors temps de càrrega i les mínimes eficiències d'emmagatzematge. Aplicant una convecció forçada s'aconseguirà una major extracció de calor, una disminució de temps d'adsorció, una disminució de temperatura de l'adsorbat i un augment en l'eficiència d'emmagatzematge.

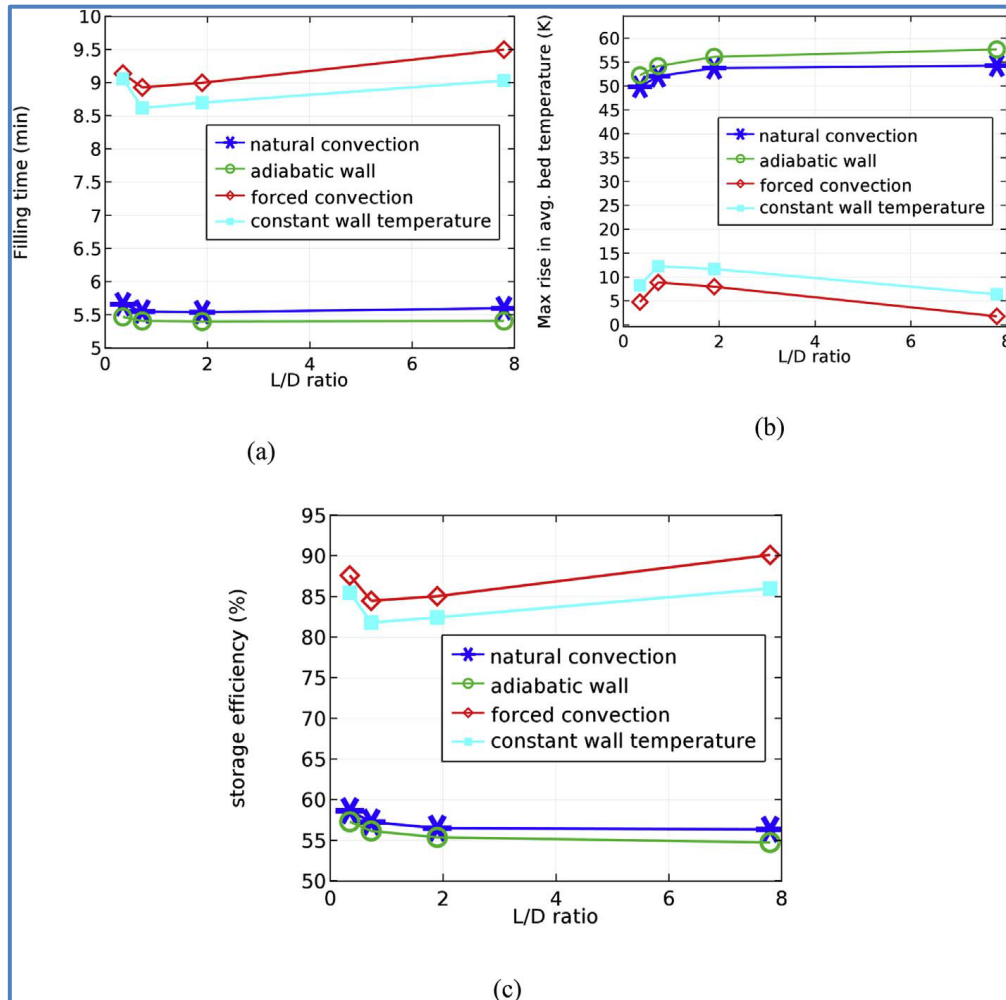


Figura 3.6. a. Temps de càrrega vs. L/D rati ; b. Màxima variació de temperatura vs. L/D rati ; c. Eficiència d'emmagatzament vs. L/D rati ; Font: [1] "Charge characteristics of adsorbed natural gas storage System". Autors: Kedar Haradas Patil, Satyabrata Sahoo.

Per a aconseguir una alta convecció no només propietats del flux ambient, com la temperatura o velocitat, juguen un paper important, sinó que és imprescindible tenir en compte el factor geomètric del adsorbent. Per a tindre en compte aquest factor se sol valorar el factor L/D (relació entre longitud i diàmetre) del monòlit d'adsorbent. Per una banda, contra major superfície lateral estigui exposada, major convecció es podrà donar. D'altra banda, contra major sigui la distància axial del monòlit, major serà el temps de carrega, ja que el adsorbat haurà de recórrer més distància fins a arribar al punt oposat del AC des del qual s'està introduint. El mateix passaria si el diàmetre fos massa gran, la calor a extreure es veuria afectada.

CAPÍTOL 6: Software utilitzat

En aquest apartat es descriuran els programes utilitzats al llarg del treball.

6.1. Solidworks

Solidworks és un software de CAD (Computer Aides Design) per a modelat mecànic en 2D i 3D. El programa permet modelar peces i conjunts, i extreure plànols tècnics com altres dades necessàries per a la producció.

En aquest projecte s'ha utilitzat per a crear les geometries, tant 2D com 3D, introduïdes a l'ANSYS sobre les quals s'han executat les simulacions. Els models 2D s'han fet creant un *sketch* i posteriorment formant una superfície. Els models 3D s'han fet part a part i després s'han assemblet amb relacions de posició.



Figura 6.1. Logo SolidWorks

6.2. Ansys

Ansys és un software de simulació per a predir com funcionarà i reaccionarà un determinat producte en un entorn real. Està desenvolupat per a funcionar amb la teoria d'elements finits per estructures i volums finits per a fluids.

Ansys incorpora diferents productes especialitzats en diferents tipus d'anàlisis com estructurals, fluidodinàmiques, electromagnètiques, multifísiques. Alguns exemples d'aquests productes són *ANSYS Design Space*, *ANSYS Mechanical*, *ANSYS Fluent* o *ANSYS Multiphysics*.

En aquest treball s'ha utilitzat *ANSYS Fluent*, una eina de computació en dinàmica de fluids que permet realitzar modelats físics per obtenir resultats ràpids i precisos en aplicacions de CFD (*Computational Fluid Dynamics*).



Figura 6.2. Logo d'Ansys Fluent

6.3. REFPROP – NIST Reference Fluid Properties

El software mini REFPROP és una versió gratuïta per a estudiants del programa REFPROP. Ha sigut desenvolupat pel “*National Institute of Standards and Technology (NIST)*” i és capaç de calcular les propietats termodinàmiques de fluids i mescles més utilitzades. Les seves característiques es visualitzen en taules i gràfics, i poden ser exportats.

Durant el treball s’ha utilitzat per calcular les propietats del metà i del nitrogen. Proporcionant punts de temperatura i/o pressió s’han consultat els estats específics i punts de saturació.

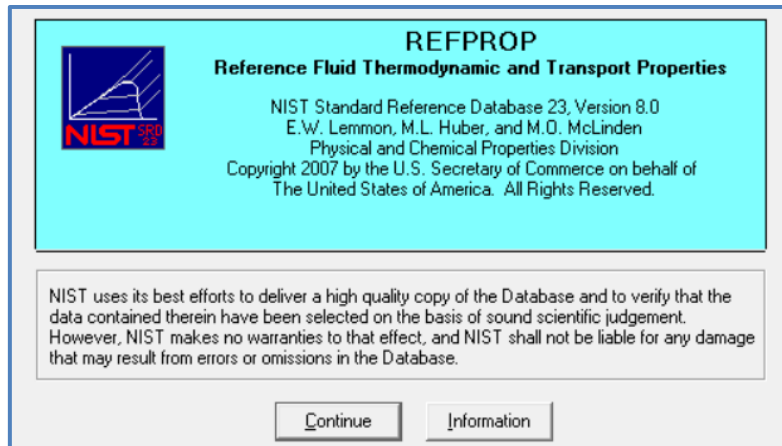


Figura 6.3. Interface del software REFPROP-NIST

6.4. Microsoft Visual Studio

El software Microsoft Visual Studio és un entorn de desenvolupament integrat (IDE - Integrated Development Environment) per a sistemes operatius Windows. Treballa amb múltiples llenguatges de programació com C, C++, Java, Python, Ruby, igual que entorns de desenvolupament web com ASP.NET MVC, Django. El software permet crear llocs i aplicacions web que es comuniquin entre estacions de treball, pàgines web, dispositius mòbils entre d’altres.

No obstant, en aquest treball ha sigut emprat per tal de crear les UDFs introduïdes a l’*Ansys Fluent*. Aquest codi ha estat escrit en C i per tant guardat amb l’extensió .c.



Figura 6.4. Logo Microsoft Visual Studio

CAPÍTOL 7: Resistències del Criòstat (2D)

Per tal d'analitzar les resistències que suposa el criòstat es simplifica el cilindre que compon l'IB i l'AC (Figura 7.1.) a una superfície plana (Figura 7.2.). Degut a que el flux de calor en el cilindre es dóna de forma radial, en 2D passa a ser un flux completament perpendicular.

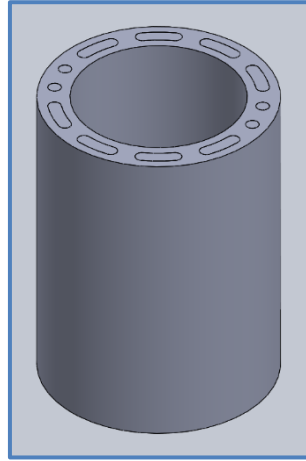


Figura 7.1. Geometria 3D AC + IB

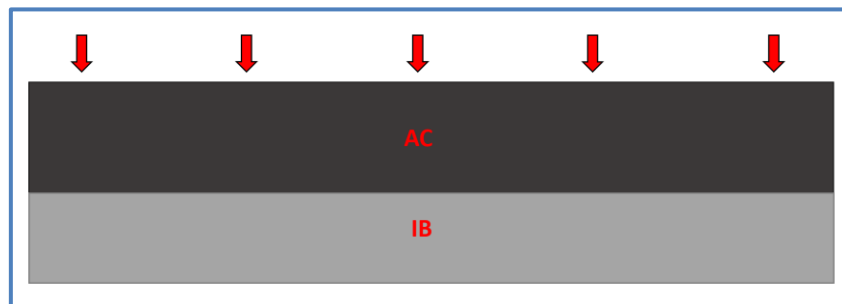


Figura 7.2. Geometria 2D AC + IB

Per a calcular l'espessor corresponent a aquesta simplificació la massa s'ha de conservar, i al mantenir la mateixa densitat, el volum també.

Dades:

$$V_{AC} = \text{Volum del AC} = 8,9594e-03 \text{ m}^3$$

$$V_{IB} = \text{Volum del IB} = 9,5564e-03 \text{ m}^3$$

$$V_{Al} = \text{Volum del alumini} = 8,165e-03 \text{ m}^3$$

$$V_{Negatiu} = \text{Volum del negatiu} = 1,392e-03 \text{ m}^3$$

$$A_{perpendicular} = 0,18378 \text{ m}^2$$

$$L_{AC} = \text{Longitud AC} = 300 \text{ mm}$$

$$L_{IB} = \text{Longitud IB} = 360 \text{ mm}$$

$$D_{IB \text{ int}} = \text{Diàmetre IB interior} = 195 \text{ mm}$$

$D_{IB\ ext} = \text{Diàmetre IB exterior} = 268\ \text{mm}$

$K_{AC} = \text{Coeficient conducció del AC} = 1,5\ \text{W/mK} *$

$K_{Al} = \text{Coeficient conducció del Alumini} = 117\ \text{W/m K}$

$\alpha_{ext\ natural} = \text{Coeficient convecció exterior natural} = 5\ \text{W/m}^2\text{K}$

$\alpha_{ext\ forçada} = \text{Coeficient convecció exterior forçada} = 700\ \text{W/m}^2\text{K}$

*El coeficient conducció del AC s'ha hagut d'aproximar en base a altres fabricants ja que no es tenen dades de *Ingevity*.

Tot i que l'allargada del IB és superior a la del AC, i per tant dins el IB hi ha espai buit per la part superior i inferior, s'aproxima la longitud a la del AC, 300 mil·límetres. Respecte el diàmetre, també es calcula respecte el diàmetre del AC, 195 mil·límetres.

$$V_{AC} = \pi D_{IB\ int} e_{AC} L_{AC} \quad (7.1.)$$

$$e_{AC} = \frac{V_{AC}}{\pi D_{IB\ int} L_{AC}} = 0,048750\text{m} = 48,750\ \text{mm} \quad (7.2.)$$

$$V_{Al} = \pi D_{IB\ int} e_{Al} L_{AC} \quad (7.3.)$$

$$e_{Al} = \frac{V_{Al}}{\pi D_{IB\ int} L_{AC}} = 0,044427\ \text{m} = 44,427\ \text{mm} \quad (7.4.)$$

El flux de calor alliberat es troba tres resistències en sèrie: la resistència del AC (R_{AC}), la resistència del IB executada per l'alumini i la de la convecció externa. Es menysprea la resistència que podria ocasionar el flux contingut dins el negatiu.

$$R_{AC} = \frac{e_{AC}}{k_{AC} A_{perpendicular}} = 0,1768\ \text{K/W} \quad (7.5.)$$

$$R_{Al} = \frac{e_{Al}}{k_{Al} A_{perpendicular}} = 2,0662e - 03\ \text{K/W} \quad (7.6.)$$

$$R_{Conv\ ext} = \frac{1}{\alpha_{ext\ natural} A_{perpendicular}} = 1,088\ \text{K/W} \quad (7.6.)$$

$$R_{TOTAL} = R_{AC} + R_{Al} + R_{Conv\ ext} = 1,2672\ \text{K/W} \quad (7.7.)$$

CAPÍTOL 8: Estudi fluid-termodinàmic de Criòstat (3D) – SIMULACIONS

8.1. Introducció al software

L'estudi fluid-termodinàmic o CFD (*Computational Fluid Dynamics*) s'ha dut a terme amb l'*Ansys Fluent*, especialista en dinàmica de fluids. Al *Fluent* s'ha accedit de dos formes diferents. Una és a través del *Workbench*, plataforma d'*Ansys* capaç de crear projectes i que té un subprograma per a cada funció: geometria, mallat, *setup*, *solution* i resultats. L'altra forma és executant directament el *Fluent* i carregant una *Mesh* en extensió .msh o directament llegint un exemple creat en .cas/.dat.

Al *Workbench*, el primer subapartat que s'ha de configurar és la *Geometry*, que executa el *DesignModeler*, on es pot crear o importar una geometria 2D o 3D. A continuació s'ha de mallar executant el *Meshing*. Segons les dimensions o les característiques de la malla els resultats seran més concrets, exactes i realistes. Amb el model ja creat i mallat, s'obre el *Setup*, que executa el *Fluent*, on es definiran totes les condicions de contorn necessàries i des d'on es llançarà el càlcul de la simulació. L'apartat de *Solution* també està vinculat al *Fluent*. Per últim, es pot accedir a *Results*, obrint el *CFD-Post* on es visualitzen i analitzen els resultats.

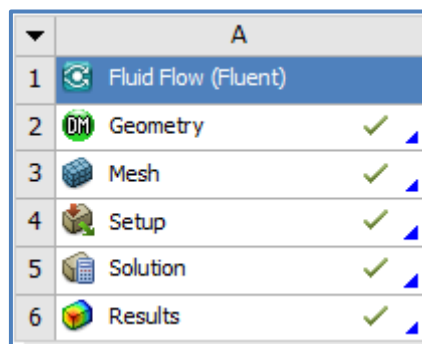


Figura 8.1. Interface del Workbench

8.2. User-Defined Functions (UDFs) i User-Defined Scalars (UDSs)

8.2.1. UDF

Una *User Defined Function* (UDF) és una funció en C que es pot carregar a l'*Ansys Fluent* per tal de modificar diferents característiques o propietats com condicions de contorn, propietats dels materials, *source terms* etc... Les UDFs s'identifiquen amb l'extensió .c i cada arxiu pot contenir diverses UDFs. Per aquest treball s'utilitzaran aquestes funcions per tal de modificar els paràmetres necessaris per a recrear l'adsorció.

Les UDFs es defineixen utilitzant ordres *MACROS DEFINE*, un tipus d'ordres introduïdes al arxiu .c que l'*Ansys Fluent* és capaç d'interpretar i aplicar a la simulació. Cada UDF ha d'estar lligada a la direcció del fitxer *udf.h*, i per això al inici de cada codi ha d'apareixer *#include "udf.h"*. Això permet la interpretació d'ordres *MACRO* i la seva inclusió en el procés de compilació.

Els arxius que contenen les UDFs poden ser interpretats o compilats. Si son interpretats, s'interpreten i es carreguen directament al *run time* en tan sols un pas. Si son compilats, primer s'ha de crear una llibreria i posteriorment carregar-la.

Per exemple, creant una UDF com:

```
#include "udf.h"
```

```
DEFINE_PROFILE(inlet_x_velocity, thread, index)
```

Després de compilar-la la *MACRO* adoptaria la forma de:

```
Void inlet_x_velocity (Thread *thread, int index)
```

Després de ser interpretades o carregades, les UDFs seran visibles i seleccionables, i podran ser vinculades al solucionador vinculant cada UDF a la *dialogue box* adient.

8.2.2. MACRO DEFINE

MACRO DEFINE són el conjunt d'ordres a través de les quals el software pot interpretar els arxius en C. Per aquest motiu, amb la utilització d'aquestes ordres no es necessari compilar els arxius.

Qualsevol ordre de DEFINE sempre tindrà el mateix format: DEFINE_ORDRE (Nom, variable₁, ..., variable_n). Per tant, per a DEFINE_PROFILE (inlet_x_velocity, thread, index); PROFILE serà l'ordre que s'està cridant, *inlet_x_velocity* el nom de la funció i, *thread* i *index* les variables.

En aquesta simulació s'utilitzaran dos tipus d'ordres de DEFINE: DEFINE_ADJUST i DEFINE_SOURCE. DEFINE_ADJUST pot ser utilitzada per tal d'ajustar o modificar variables del *Fluent* que no son arguments. I DEFINE_SOURCE s'utilitza per especificar *source terms* pels diferents tipus d'equacions de transport.

Després que una funció DEFINE_SOURCE o DEFINE_ADJUST sigui interpretada/compilada, l'argument que se li dona es tornarà visible i seleccionable a la *dialogue box* corresponent. Per exemple, per a la UDF_MASS: DEFINE_SOURCE(mass_source,c,t,dS,eqn) un cop sigui interpretada/compilada, el terme "mass_source" serà seleccionable.

8.2.3. UDS

L'*Ansys* te varies magnituds principals (*source terms*) com massa, moment o energia. En el cas que es vulgui definir una altre variable independent s'haurà de crear com un *User-Defined Scalar (UDS)*. Els UDS es regeixen per l'equació general de transport:

$$\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(F_i \phi_k - \tau_k \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \right) = S_{\phi_k} \quad k=1, \dots, N_{\text{scalars}} \quad (8.1.)$$

El primer terme fa referencia al *unsteady*, el segon a la *convection*, el tercer a la *diffusion* i el quart a la *source*. (ϕ_k fa referencia a un escalar arbitrari).

Es poden definir a *User-Defined, Scalars* augmentant el nombre d'escalars fins els desitjats. És important destacar que l'índex parteix de 0 i que per tant, si per exemple es volen 3 UDS s'haurà d'assignar l'índex 2.

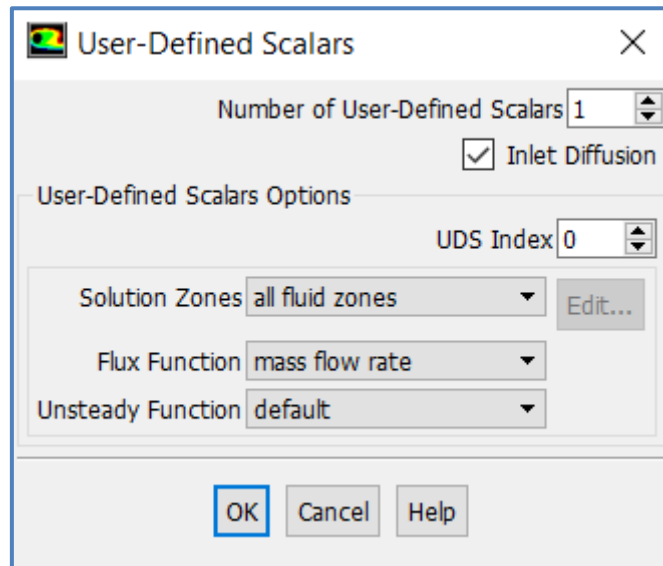


Figura 8.2. Dialogue box User-Defined Scalars

A *Number of User-Defined Scalars* s'especifica el nombre d'UDS. A dins d'*User-Defined Scalar Options*, *UDS Index* indica a quin UDS s'està fent referència i *Solution Zones* a quina zona s'aplica aquest UDS (a totes les zones, a totes les zones sòlides, a totes les zones de fluid o a les seleccionades).

Cadascun dels quatre components (*unsteady*, *convection*, *diffusion* i *source*) es pot definir utilitzant una macro en concret:

Unsteady: Es pot definir a *User-Defined Scalar Options*, *Unsteady Function* escollint entre: *default* (per defecte), *none* (per anular el terme) o el terme carregat utilitzant l'ordre MACRO `DEFINE_UDS_UNSTEADY`.

Convection: O també concebut com a *flow* es pot definir a *User-Defined Scalar Options*, *Flux Function* escollint entre: *Mass flow rate* (cabal màssic), *none* (per anular el terme) o el terme carregat utilitzant l'ordre MACRO `DEFINE_UDS_FLUX`.

Diffusion: Es pot definir a *Create/Edit Materials*, *UDS Diffusivity* escollint entre: *Defined-per-uds* per donar-li un valor constant o *user-defined* per assignar-li el terme carregat amb la MACRO `DEFINE_DIFFUSIVITY` en el cas de ser difusivitat isotròpica o `DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY` en el cas de ser difusivitat anisotròpica.

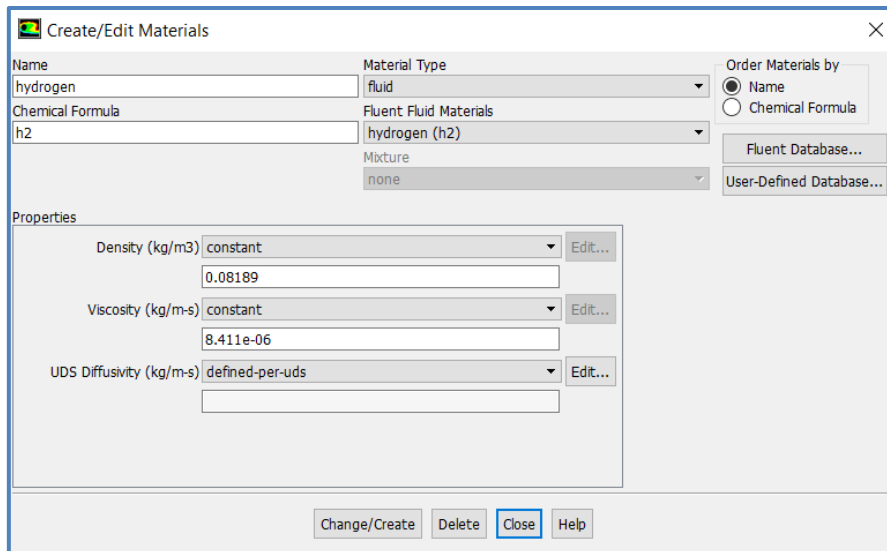


Figura 8.3. Create/Edit Materials dialogue box - UDS Diffusivity

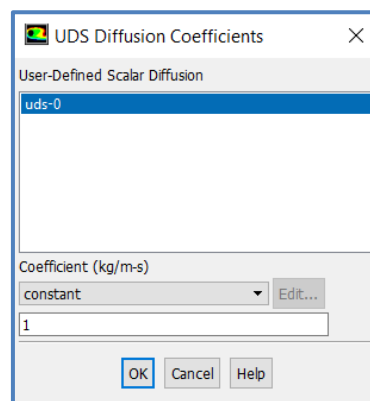


Figura 8.4. UDS Diffusion Coefficients dialogue box

Source: Es pot definir a *Cell zone conditions*, habilitant l'opció de *Source terms* escollint entre: constant, none (per anular el terme) o el terme carregat utilitzant la `MACRO DEFINE_SOURCE`.

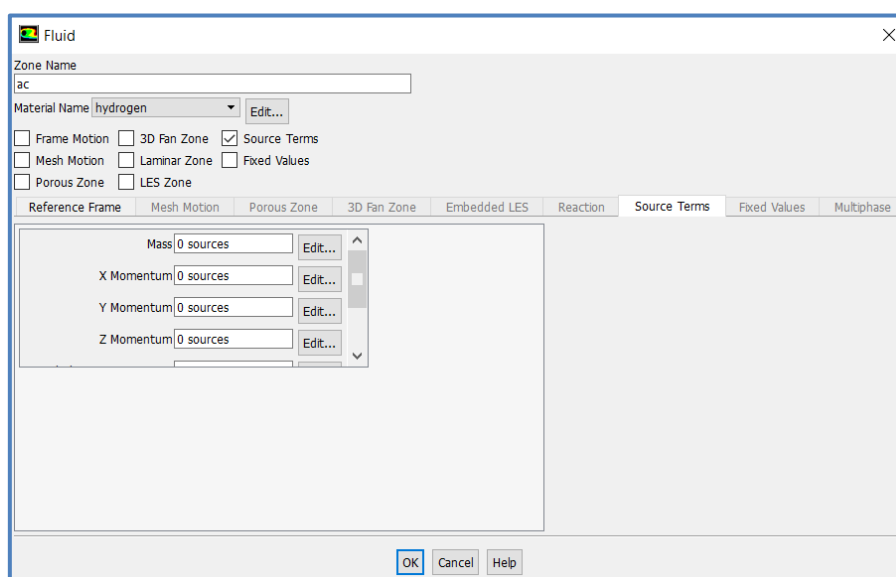


Figura 8.5. Fluid dialogue box - Source terms

No obstant, tot i que cada terme està especificat per a ser definit amb una MACRO en concret, també s'ha comprovat que amb l'ordre DEFINE_ADJUST es poden modificar aquests termes.

8.2.4. UDFs per la simulació d'adsorció

Per tal de recrear l'adsorció a la simulació s'han de variar tres paràmetres. Per una banda, es modifiquen les equacions de conservació de massa i energia. Degut a que la massa i l'energia formen part de les magnituds principals (*source terms*) del software, així com el moment, es pot vincular una UDF directament a aquests *source terms*. Per contra, en el cas de l'adsorció, al no ser un *source term* s'ha de definir a través d'una UDS (*User defined scalar*), i a aquesta vincular-li la UDF que la defineixi.

El fitxer .c que contindrà aquestes tres UDFs es creat en base a l'estudi de *Ye, Feng, Jinsheng Xiao, Binxiang Hu, Pierre Benard, i Richard Chahine* [20] sobre l'adsorció d'hidrogen. Aquest fitxer contindrà tres UDFs: UDF_ADSORPTION, UDF_MASS i UDF_ENERGY.

8.2.4.1. UDF_ADSORPTION

El model d'adsorció que s'aplica a la simulació es basa en les isoterms d'adsorció de Dubinin-Astakov (D-A model). L'adsorció absoluta descrita a l'equació (4.9.) pot ser expressada com:

$$n = n_{max} \exp \left[- \left(\frac{RT}{\alpha + \beta T} \right)^m \ln^m \left(\frac{P_0}{P} \right) \right] \quad (8.2)$$

n_{max} = adsorció màxima [mol/kg] = 71,6 mol/kg

$m = 2$

T = temperatura

R = constant dels gasos ideals [J/mol K] = 8,314 J/mol K

P = pressió en equilibri

P_0 = pressió de saturació = 1470 MPa

α = factor entàlpic = 3180 J/mol

β = factor entròpic = 18,9 J/mol K

Al UDS que representa l'adsorció absoluta se li vincula la UDF_ADSORPTION. Aquesta UDF defineix l'adsorció a través de DEFINE_ADJUST i utilitza quatre *build_in* funcions.

C_T: obté la temperatura d'una cel·la

C_P: obté la pressió absoluta d'una cel·la

RP_Get_Real: obté la pressió de funcionament d'una cel·la

C_UDSI: emmagatzema l'adsorció absoluta de cada cel·la a cada iteració

```
#include "udf.h"

DEFINE_ADJUST(adsorption, domain)
{
    Thread* t; cell_t c; int ads; real E,A,P;
    thread_loop_c(t, domain)
    {
        begin_c_loop(c, t)
        {
            real tem=C_T(c, t);
            P=C_P(c, t)+RP_Get_Real("operating-pressure");
            E=3080+18.9*tem;
            A=8.31429*tem*log(1.47E9/P);
            C_UDSI(c, t, ads)=71.6*exp(-A*A/(E*E));
        }
        end_c_loop(c, t)
    }
}
```

Figura 8.6. UDF_ADSORPTION.c

8.2.4.2. UDF_MASS

A l'hora de fer la càrrega del LNG, el metà passa de fase gasosa a fase d'adsorció. Per contra, a l'hora de fer la descàrrega es passa de fase d'adsorció a fase gasosa. Per tant, a l'equació de conservació de massa s'ha d'afegir un terme (*mass source term*) que reflecteixi el canvi de fase del metà.

El *mass source term* pot ser expressat com:

$$S_m = -(1 - \varepsilon_b) \rho_p M_{CH_4} \frac{\partial n}{\partial t} \quad (8.3.)$$

ε_b = porositat

ρ_p = densitat del AC [kg/m³]

n = adsorció dinàmica [mol/kg]

M_{CH_4} = massa molecular del metà [kg/mol]

El factor $\delta n / \delta t$ es calcula a través del model LDF (*Linear Driving Force*). El rati d'adsorció proporcionat pel model LDF és:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = k(n^* - n) \quad (8.4.)$$

n^* = adsorció absoluta calculada pel model D-A

k = coeficient de transferència de massa (fixat a 0,15 s⁻¹).

De les anteriors formules (8.3.) i (8.4.) s'extreu:

$$S_m = -(1 - \varepsilon_b) \rho_p M_{CH_4} k(n^* - n) \quad (8.5.)$$

Transformada pel mètode de diferències finites:

$$n_i = n_{i-1} + k(n_{i-1}^* - n_{i-1})(t_i - t_{i-1}) \quad (8.6.)$$

On ϵ_b , p_p , M_{CH_4} , K són constants.

L'adsorció dinàmica n_i de cada iteració es calculada per la formula (8.6.), l'adsorció en equilibri n_i^* de cada iteració per la formula (8.2.) i el *mass source term* de cada iteració per la formula (8.5.).

Per tal d'aconseguir el *mass source term* s'escriuen tres UDFs.

DEFINE_ADJUST (q_ads, domain): calcula i emmagatzema l'adsorció dinàmica n_i de cada iteració.

DEFINE_ADJUST (d_ads, domain): calcula i emmagatzema el *mass source term* de cada iteració.

DEFINE_SOURCE (m_source, t, dS, eqn): Especifica el valor de C_UDSI_M1 (c, t, d_ads) com el *mass source term*.

```
#include "udf.h"

DEFINE_ADJUST(q_adsorption, domain)
{
    Thread*t; cell_t c; real dt; int ads; int q_ads;
    thread_loop_c(t, domain)
    {
        begin_c_loop(c, t)
        {
            dt = RP_Get_Real("physical-time-step");

            C_UDSI(c, t, q_ads) = C_UDSI_M1(c, t, q_ads) + 0.15 * dt * (C_UDSI_M1(c, t, ads) -
            C_UDSI_M1(c, t, q_ads));
        }
        end_c_loop(c, t)
    }
}

DEFINE_ADJUST(d_adsorption, domain)
{
    Thread*t; cell_t c; int d_ads; int ads; int q_ads;
    thread_loop_c(t, domain)
    {
        begin_c_loop(c, t)
        {
            C_UDSI(c, t, d_ads) = -0.532224 * 0.15 *
            (C_UDSI(c, t, ads) - C_UDSI(c, t, q_ads));
        }
        end_c_loop(c, t)
    }
}

DEFINE_SOURCE(mass_source, c, t, dS, eqn)
{
    int d_ads;
    dS[eqn] = 0.0;
    return C_UDSI_M1(c, t, d_ads);
}
```

Figura 8.7. UDF_MASS.c

8.2.4.2.1. LDF model

Els termes de les equacions de continuïtat i energia depenen del rati d'adsorció. És a dir, la generació de massa en l'equació de continuïtat depèn del rati d'adsorció i la quantitat d'energia generada en l'equació de l'energia depèn del rati pel qual l'adsorbat és adsorbit o desorbit. És per això que és important proporcionar una definició precisa del rati d'adsorció. Un dels models més utilitzats és el model LDF i descriu el rati d'adsorció com:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{15 D_{eff}}{r_p^2} (n_{eq} - n) \quad (8.7.)$$

D_{eff} = Difusivitat efectiva

n = adsorció

n_{eq} = adsorció en equilibri

r_p = radi de la partícula

I aproximant $15 D_{eff}/r_p^2$ a un paràmetre k s'arriba a l'equació (8.4.).

El model LDF s'utilitza amb freqüència i èxit en cinètiques d'adsorció de gasos perquè és simple, analític i físicament consistent. No obstant, segueix havent diferències entre les característiques de les isoterms d'adsorció entre aquest model i altres models més rigorosos, com podria ser el model Fickian Diffusion (FD). Està demostrat que, utilitzant sistemes de models simples, la cinètica d'adsorció a un porus simple o a l'adsorbent a nivell de partícula no funciona correctament:

- Avaluant el rati d'adsorció global a porus sòlids heterogenis.
- Calculant l'avanç de corbes d'una columna d'adsorbent.
- Establint l'eficiència de separació mitjançant un procés d'adsorció a causa de la mitjana repetida propietat de la base cinètica.

És per això que el model LDF funciona a la pràctica.

El model FD s'utilitza sovint per analitzar la isoterma d'adsorció de gasos per adsorbents per tal d'estimar un paràmetre que defineixi la difusivitat. El model LDF, amb un coeficient de transferència de massa global, s'utilitza amb molta freqüència per a l'anàlisi pràctica de dades i pel disseny de processos adsorbents.

Tot i que les característiques de la isoterma d'adsorció dels dos models són substancialment diferents, el model LDF funciona perquè l'estimació del rendiment de separació d'un procés d'adsorció requereix diversos conjunts de mitjanes de les propietats cinètiques a la partícula, la columna i el conjunt de nivells cíclics d'estat estacionari. Les característiques dels models descrivint els ratis locals d'adsorció a nivell de partícula es perden sovint durant aquesta integració de processos.

No obstant la investigació de *Sircar, S., i J. R. Hufton* [17] demostra mitjançant l'ús de senzills sistemes que el rati d'adsorció total mitjançant un adsorbent porós heterogeni, format per un conjunt de porus paral·lels, pot ser correctament descrit pel model FD com pel LDF caracteritzant el transport de gas en porus individuals.

8.2.4.3. UDF_ENERGY

La *energy source term* pot ser definida executant una UDF (UDF_ENERGY) definida utilitzant DEFINE_SOURCE.

L'equació de conservació d'energia es pot expressar com:

$$S_h = \frac{-\Delta H S_m}{M_{H_2}} \quad (8.8.)$$

La calor d'adsorció pot ser obtinguda a través de:

$$\Delta H = \alpha \sqrt{\ln(n_{max} - n^*)} \quad (8.9.)$$

$\alpha = 3180$ [J/mol]

n_{max} = adsorció màxima [mol/kg] = 71,6 mol/kg

n^* = adsorció absoluta (proporcionada per la formula (9.1))

Per tal d'aconseguir l'*energy source term* s'escriuen dos UDFs.

DEFINE_ADJUST (H_adsorption, domain): calcula i emmagatzema la calor d'adsorció de cada iteració.

DEFINE_SOURCE (energy_source, c, t, dS, eqn): Calcula i especifica l'*energy source term*.

```
#include "udf.h"

DEFINE_ADJUST(H_adsorption, domain)
{
    Thread*t;
    cell_t c;
    int ads;
    int H_ads;
    real p_operating, p_static;
    thread_loop_c(t, domain)
    {
        begin_c_loop(c, t)
        {
            C_UDSI(c, t, H_ads) = 3080 * sqrt(log(71.6 / C_UDSI_M1(c, t, ads)));
        }
        end_c_loop(c, t)
    }
}

DEFINE_SOURCE(energy_source, c, t, dS, eqn)
{
    real e_source;
    int d_ads;
    int ads;
    e_source = -
    C_UDSI_M1(c, t, d_ads) * 0.496056352e3 * 3080 * sqrt(log(71.6 / C_UDSI_M1(c, t, ads)));
    dS[eqn] = 0.0;
    return e_source;
}
```

Figura 8.8. UDF_ENERGY.c

8.3. Exemples de models

Per tal d'entendre quins havien de ser els paràmetres que s'havien de configurar i com s'havien de configurar es va optar per fer exemples més simples primer. I un cop aquesta base estigués fiançada encarar la simulació del meu model.

Els exemples han sigut escollits pel seu contingut i cadascun d'ells respon a una necessitat d'aprenentatge així com crear transferència de calor, crear zones poroses, entendre la relació entre superfícies de contacte, aplicar UDF i UDS. És a dir, cadascuna de les condicions de contorn que hauria de ser declarada perquè el programa simulés de forma correcta.

En la primera simulació s'introdueixen diferents procediments bàsics que s'hauran de dur a terme en els següents exemples. Per tant, als altres exemples aquests aspectes bàsics no es tractaran, sinó que només es destacaran els conceptes nous.

8.3.1. Mixing Elbow

El primer exemple a executar escollit es tracta d'un colze on es barregen dos fluids (*mixing elbow*).

Primer de tots s'ha de seleccionar el tipus d'*Analysis System* al *Workbench*, en aquest i en els següents casos serà el *Fluid-Flow (FLUENT)*. Gràcies al *DesignModeler* es pot crear o importar una geometria ja existent. En el cas concret d'aquest exemple la geometria es donada i per tant només s'ha de carregar. Una acció necessària a dur a terme a la geometria és crear les diferents *Named Selections* necessàries després al *setup*. Gràcies a aquesta funció, se li poden assignar noms a les arestes, cares o volums que vulguem. Normalment, les *Named Selections* que se solen crear són els *Inlets*, *Outlets*, *walls* o volums.

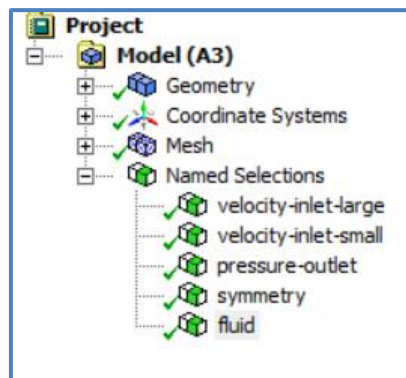


Figura 8.9. Arbre del projecte

Posteriorment, executant el *Meshing* es malla la geometria en qüestió.

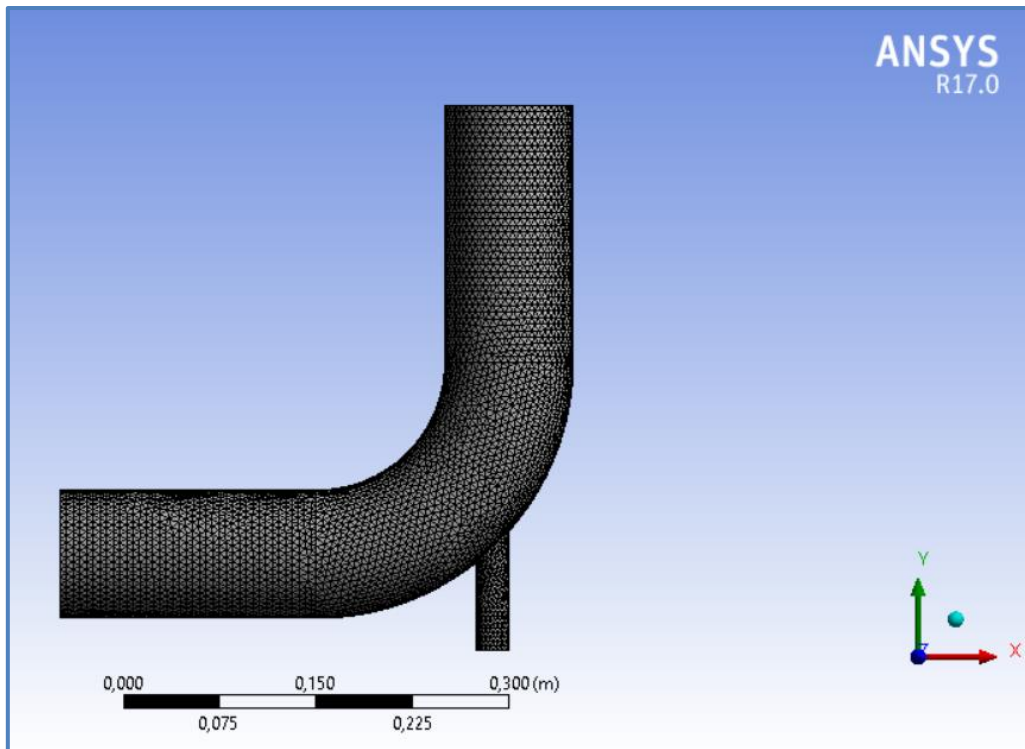


Figura 8.10. Mixing Elwob Meshing

Un cop la malla està llesta ja es pot executar el *Setup*, on s'assignen els materials, les seves propietats, les condicions de contorn... Pel que fa als materials, en aquest exemple se li associa a tot el volum condició de fluid (aigua). També és imprescindible definir les condicions de contorn de cada zona. Les més comuns són els inlets i outlets.

Inlets: Se'ls hi sol associar el *type* de *mass-flow-inlet* o *velocity-inlet*, com en aquest cas. A la pestanya de moment, per a *Velocity Specification Method* es selecciona *Magnitude, normal to boundary* i per a *Reference Frame, Absolute*. S'introdueix la velocitat d'entrada (m/s) i la pressió, que en aquest cas es deixa a 0 per defecte. A l'apartat de *Turbulence* s'opta pel mètode de *Intensity and Hydraulic Diameter* on es defineix la *Turbulent Intensity* a un 5% i l'*hydraulic diameter*, 25 i 100 mm per a cada *inlet*. A la pestanya de *Thermal* es defineix la temperatura d'entrada constant, també dependent de cada *inlet*, 313,15 i 293,15 K.

Outlets: S'acostuma a associar el *type* de *pressure-outlet*. En aquest cas només es comprova que el *Backflow reference frame* estigui en *Absolute* i el *Backflow direction specification method* estigui en *Normal to boundary*. Es defineix, igual que pels inlets, l'apartat de *Turbulence*. Res més es modifica, ni a l'apartat de *thermal*. D'aquesta forma no es condiciona cap altra propietat i el que s'espera dels outlets es poder observar quin són els resultats de la simulació.

Pel que fa als *solutions methods* es selecciona el tipus *SIMPLE*. Es defineix el Gradient de l'*Spatial discretization* com a *Green-Gauss Node based*, ja que es un mètode que se sol suggerir per a la resolució de malles tetraèdriques, com és aquest cas.

També és important revisar a l'apartat de *Solving, Reports, els Residuals*. Apareix per defecte la *continuity, x-velocity, y-velocity, z-velocity, k* i *epsilon* com a 0,001 i *energy* com a 1e-06.

Aquestes variables seran monitoritzades i comprovades pel FLUENT a l'hora d'executar la solució per tal de determinar la convergència d'aquesta.

També mostra com definir quines són les solucions que es volen extreure i/o graficar de la simulació. En aquest cas, degut a que la incògnita és la temperatura a l'*outlet* es selecciona el *Surface report definition*, on s'habilita també la funció de *Report file* i *Report plot*, per tal de generar un arxiu i una gràfica amb la solució generada.

Finalment, a *Solving, Run calculation* s'introdueix el número d'iteracions a 300 i es calcula. Alhora que calcula es pot observar com va graficant tant els residuals com aquelles propietats especificades a ser mostrades, en aquest cas la temperatura de sortida a l'*outlet*.

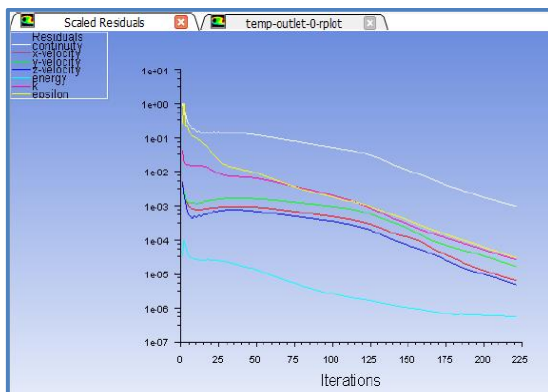


Figura 8.11. Gràfic de Residuals

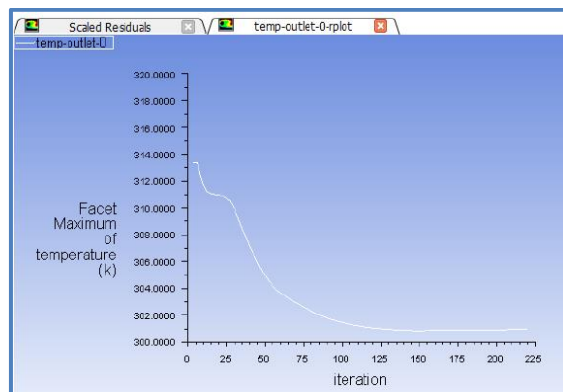


Figura 8.12. Gràfic de Temperatura Outlet

Un cop acabat el càlcul es poden visualitzar els *Results* executant el *CFD-Post*. En aquest cas es mostren, respecte al pla de simetria de la canonada, la velocitat i la temperatura.

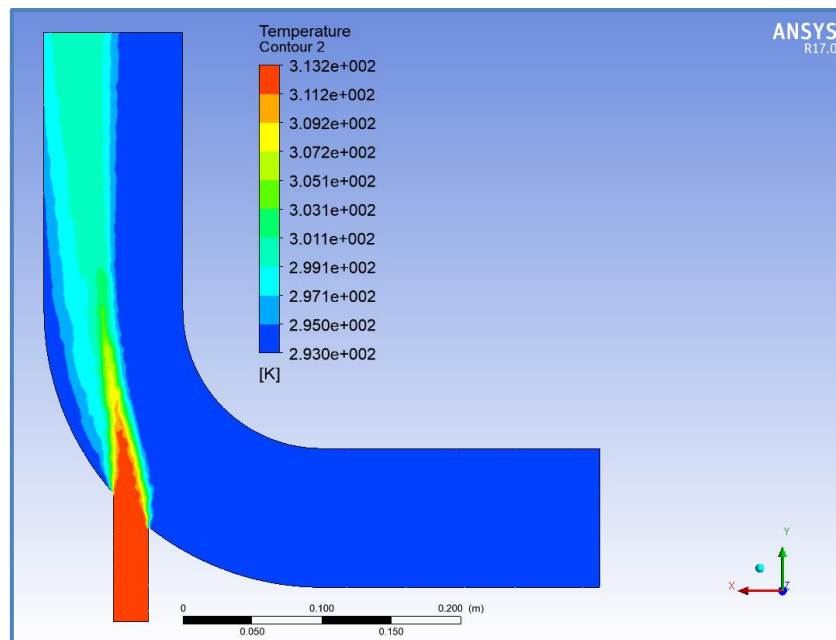


Figura 8.13. Resultats de Temperatura

8.3.2. Heat exchanger – Shell and Tube

Aquest exemple tracta un bescanviador de calor de tub i cuirassa. La geometria està composta principalment per tres components:

Fluid: Es tracta del fluid que circula per l'interior del *tube*, que correspondrà al fluid fred del bescanviador. En aquest cas serà aigua líquida introduïda a una temperatura de 12 °C i una velocitat de 1 m/s.

Tube: Correspon al tub que separa el fluid fred del fluid calent. El material pel qual està format és coure.

Shell: Es tracta del fluid que circula per la cuirassa, rodejant el serpentí del tub. Aquest fluid calent és aigua líquida introduïda a 95 °C i 1 m/s.

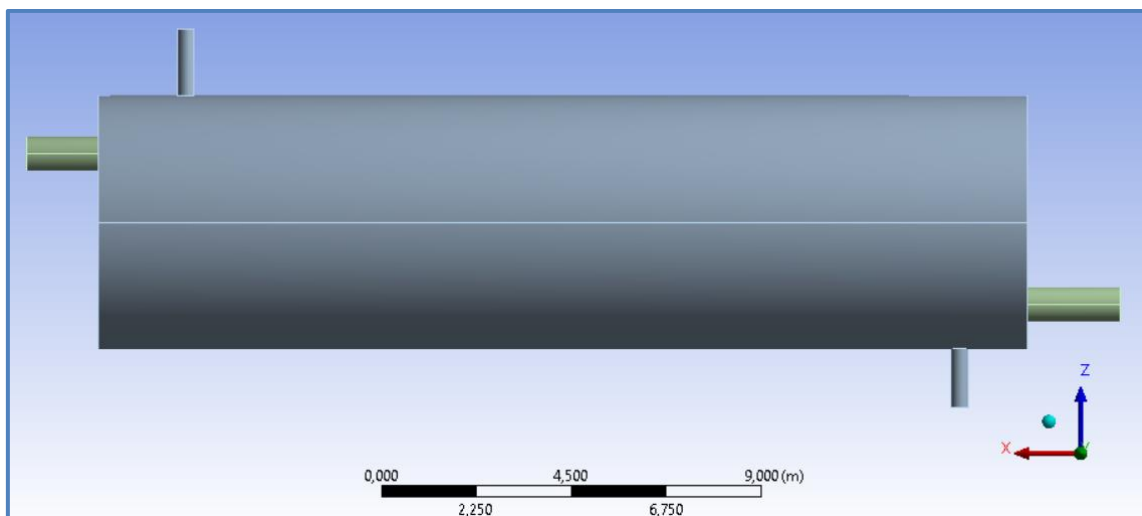


Figura 8.14. Geometria 3D del Heat exchanger - Shell and Tube

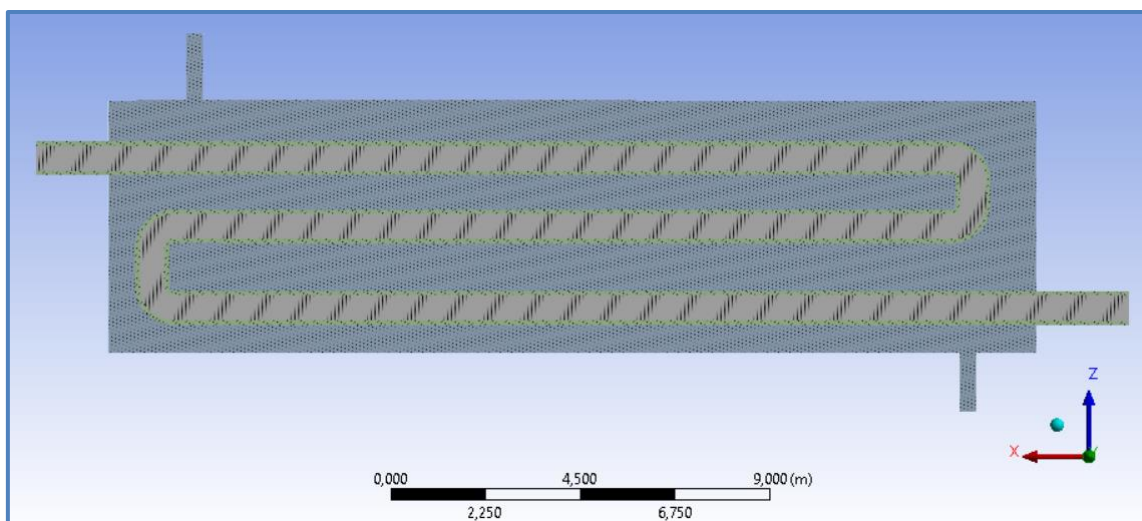


Figura 8.15. Secció parcial de la geometria 3D del Heat exchanger - Shell and Tube

L'aprenentatge principal d'aquest exemple són totes les condicions que se li ha de donar perquè la simulació pugui interpretar de manera correcta la transferència de calor entre diferents geometries, ja sigui sòlid-sòlid, fluid-fluid o sòlid-fluid.

Primer de tot, quan hi ha un contacte entre diferents geometries, l'ansys crea automàticament *Connections o Contact Regions*, expressades com a *Interfaces*. Cada *Interface* està composta per la *Source* i la *Target*, corresponent cadascuna a una de les geometries que estan en contacte. En aquest exemple es van crear dos *interfaces*:

Interfaces	Source	Target
Interface 1	Superfície exterior del <i>tube</i>	Superfície de la <i>Shell</i> que està en contacte amb el <i>tube</i>
Interface 2	Superfície exterior fluid	Superfície interior del <i>tube</i>

Figura 8.16. Taula Interfaces

Quan una *interface* es creada al *Meshing*, posteriorment al *setup* es fa visible una condició anomenada *Mesh Interfaces*. Aquí és on es poden administrar les diferents *interfaces*. En aquest cas, s'han d'eliminar les dos *mesh interfaces* creades automàticament i tornar a seleccionar manualment, tant per la *interface 1* (i1) com per la *interface 2* (i2), la *source* (src) i la *target* (trg). S'han d'eliminar i tornar a seleccionar manualment perquè és així com es pot accedir a les *Interface Options*. L'opció d'interès i que s'ha de seleccionar a l'hora de crear les dos *interfaces* és la *Coupled wall*. Gràcies a aquesta opció el software serà capaç d'interpretar que aquestes dos superfícies actuen tèrmicament com emparellades, i per tant es donarà transferència de calor. Si no s'habilita aquesta opció cadascuna de les superfícies estaria aïllada i no hi hauria interacció entre elles.

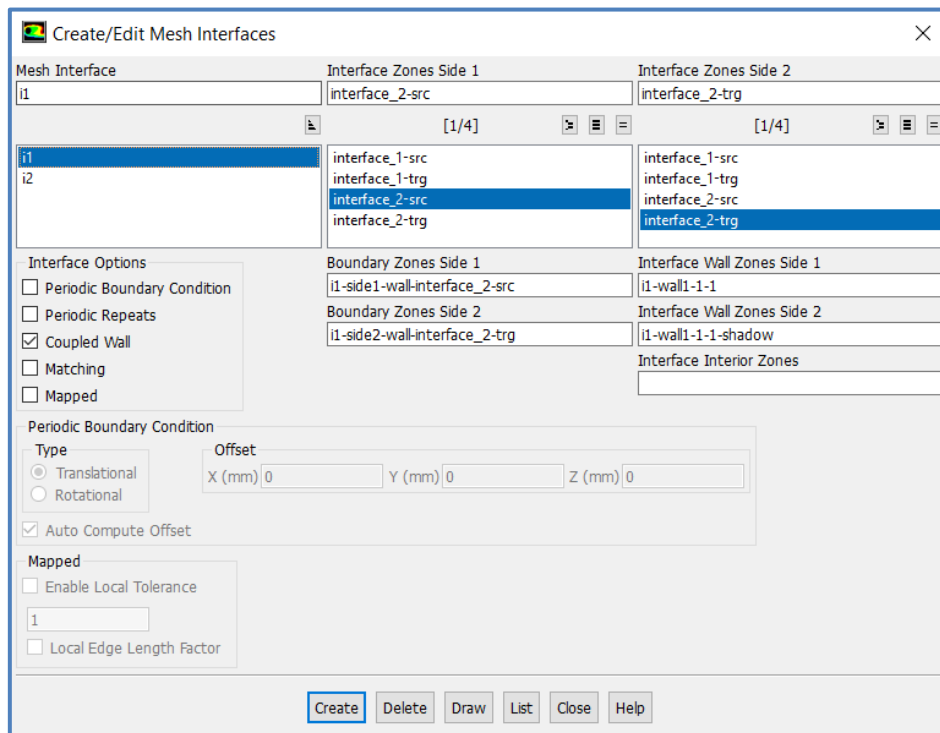


Figura 8.17. Creació de Mesh Interfaces

En el cas que el software creï automàticament *contact regions* que no desitgem o no són les adequades també és possible crear-les manualment. En aquest cas hauríem d'eliminar la creada automàticament i a través de la funció *Named Selection* seleccionar les superfícies que farien de *source* i *target*, individualment. Al *setup* se li hauria de donar condició d'*interface* a les dos *named selection* creades. Per últim, tal i com es mostra a la Figura 8.17. s'hauria de crear una *mesh interface* unint la *source* i la *target*, habilitant l'opció *coupled wall*.

Un cop executat el càlcul, obrint el *CFD-Post* i creant un *Contour* al pla vertical de la geometria es poden observar els canvis de temperatura al fluid, al *tube* i la *shell*. S'observa com el fluid de la *shell* es refreda respecte l'*inlet* i el fluid del tub s'escalfa respecte l'*inlet*. També, les zones més calentes del *tube* són aquelles que estan en contacte a la cantonada superior esquerra on impacta directament el fluid calent d'entrada.

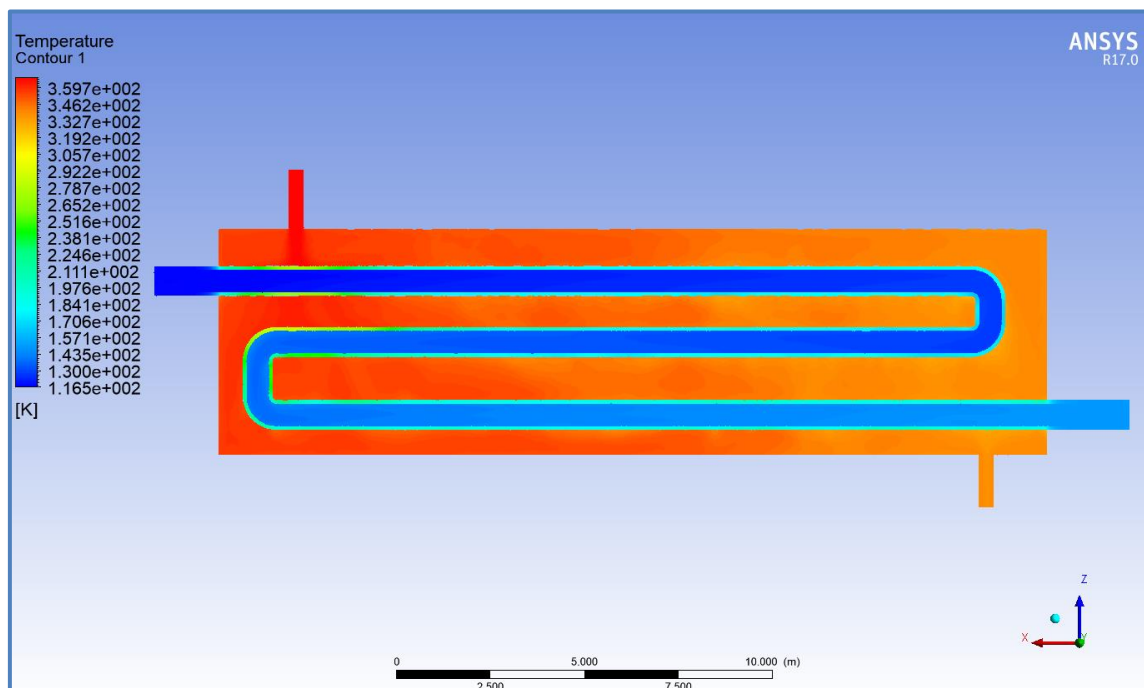


Figura 8.18. Resultats del perfil de temperatura

Aquest exemple de *Shell and Tube* ha sigut molt útil, no només per veure les superfícies de contacte i com crear transferència de calor, sinó també per fer diferents proves variant el fluid emprat (aigua, aire, N_2 etc...) i la temperatura i pressió d'entrada per tal de veure com afectava el sistema.

8.3.3. Porous Media

Aquest exemple exemplifica la funció de *Porous Zone* del *Fluent*, utilitzada en el modelatge d'un fluid a través d'un mitjà porós en aplicacions industrials del tipus de filtres o capes catalitzadores. En aquest cas es tracta d'un catalitzador. Amb aquest exemple s'aprèn a crear la zona porosa del substrat amb les resistències apropiades, calcular una solució utilitzant el *pressure-based solver*, graficar la velocitat i la pressió a diferents plànols especificats de la geometria i determinar la diferència de pressió.

Aquest és el model tridimensional sobre el qual s'executaran els càlculs. La part esquerra és l'*inlet*, la dreta l'*outlet* i la part central el substrat o zona porosa.

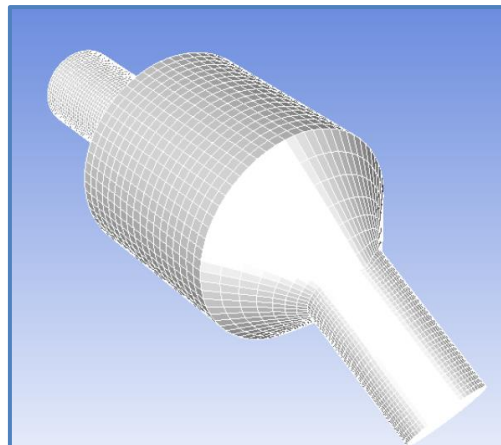


Figura 8.19. Geometria 3D del Porous Media

A *Setting up physics*, es configura el *solver*.

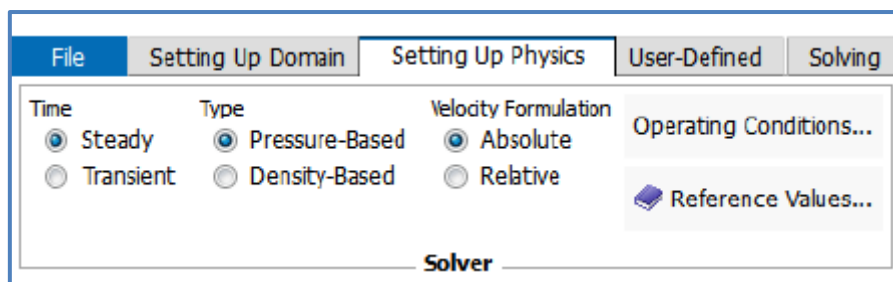


Figura 8.20. Setting Up Physics

I també el tipus de *Model* com *Viscous*.

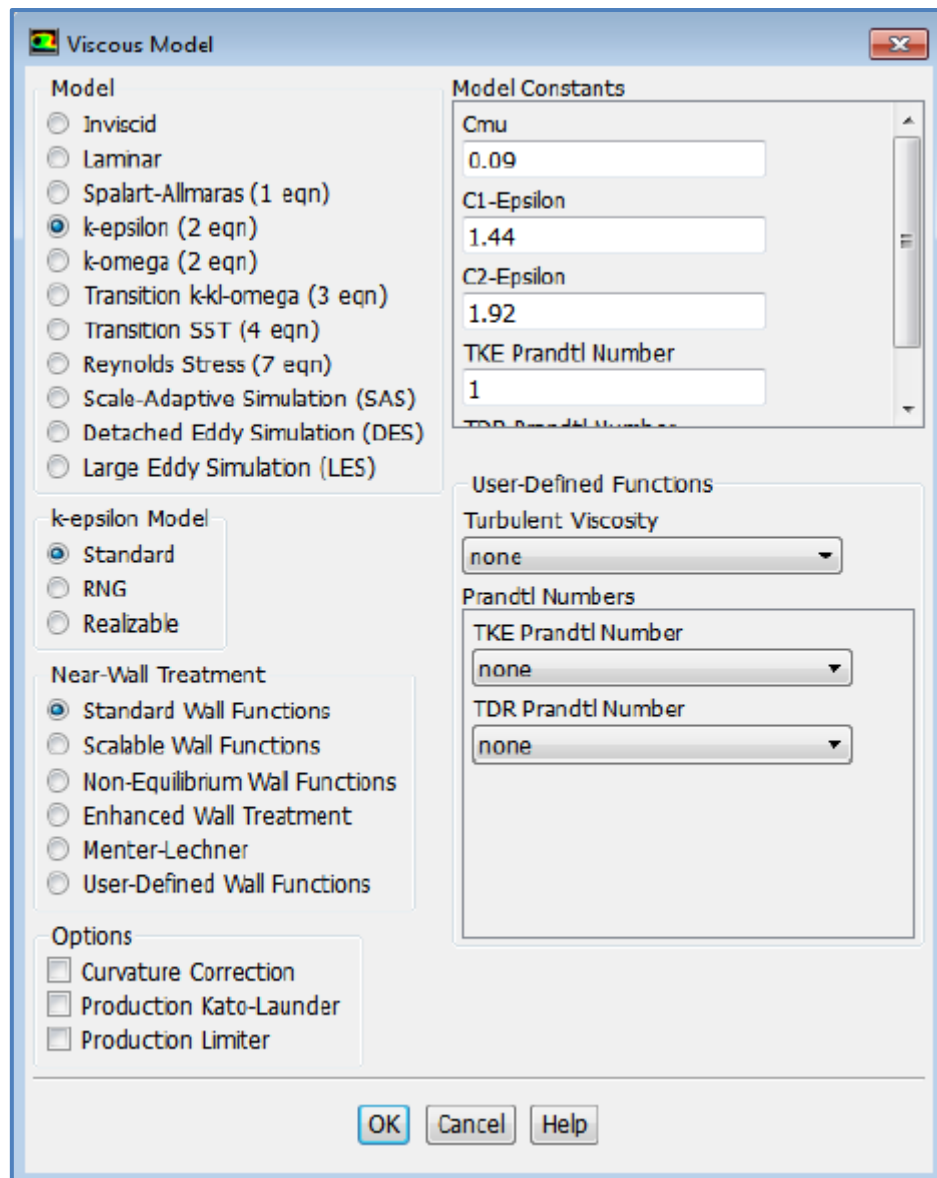


Figura 8.21. Viscous Model dialogue box

A materials es selecciona de la base de dades de l'Ansys l'aire i el nitrogen (n2) com a fluids.

La *Cell Zone Condition* del substrat ha de ser definida com a fluid. És a dir, perquè el software sigui capaç d'entendre-ho, en comptes de crear una zona sòlida porosa i fer que passi un fluid a través, es declara com una zona de fluid i se li dona els valors de les resistències que hi haurien si hi hagués un mitjà porós. Per poder definir les resistències s'ha d'habilitar la *Porous Zone*. Les resistències a especificar són la *Viscous Resistance* i la *Inertial Resistance*.

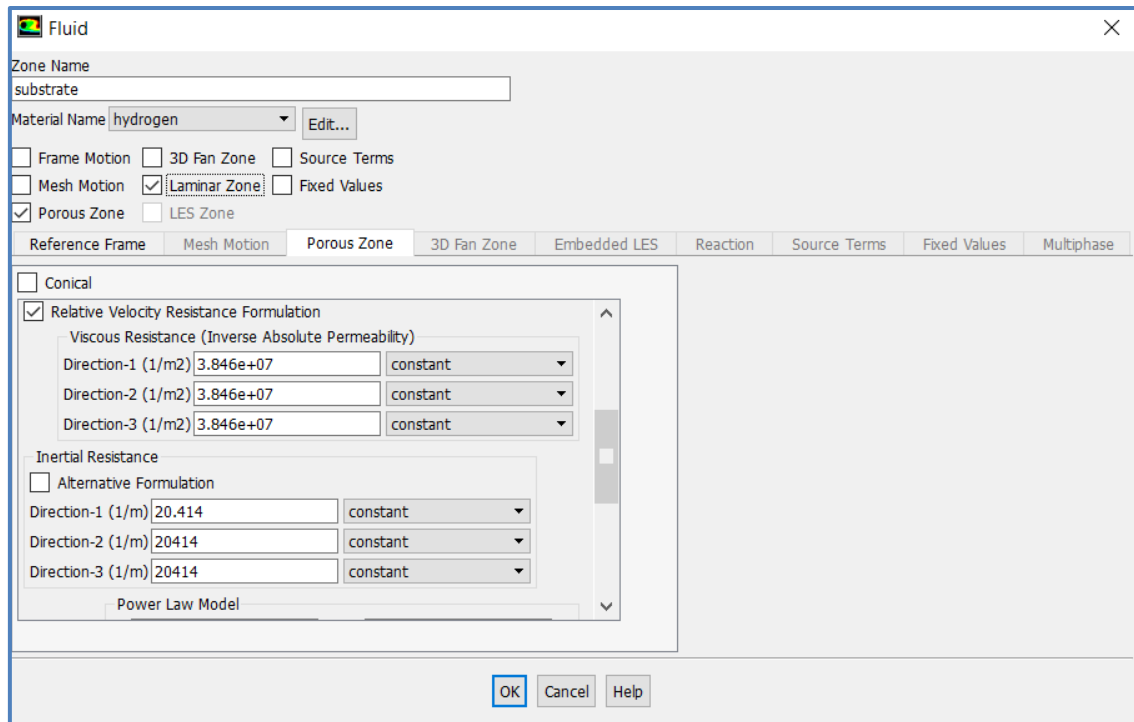


Figura 8.22. Fluid Interface

A la imatge es mostra com es defineixen les dos resistències amb els valors proporcionats per l'exemple. No obstant, l'Ansys facilita la formulació necessària per poder adaptar cada cas en concret i calcular les dos resistències.

Defineix la *Viscous Resistance* com l'invers d'alfa i la *Inertial Resistance* com C_2 .

$$\alpha = \frac{D_p^2}{150} \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2} \quad (8.10.)$$

$$C_2 = \frac{3,5}{D_p} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \quad (8.11.)$$

D_p = Diàmetre de la partícula

ε = Porositat = Fracció buits = Volum de buits / Volum total del substrat

A les *Boundary Conditions* es configuren l'*inlet* i l'*outlet*.

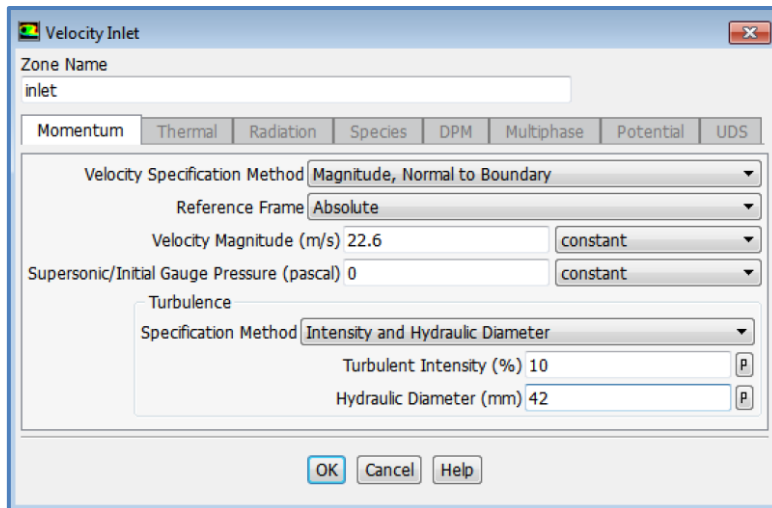


Figura 8.23. Velocity Inlet

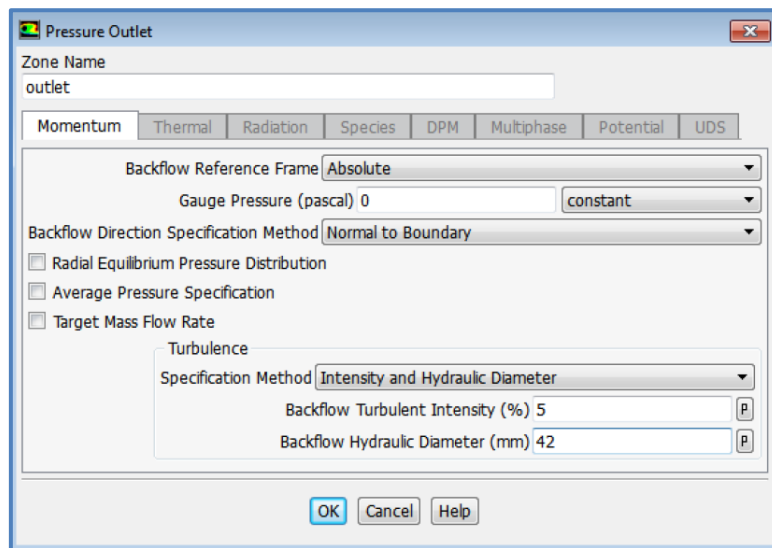


Figura 8.24. Pressure Outlet

Es configuren els *Solutions Methods* i la *Solution Initialization*. Al tipus d'Inicialització *Standard* és el model recomanat per a simulacions de mitjans porosos. El model *Hybrid* no té en compte les propietats del mitjà porós, i depenent de les condicions de contorn, pot produir un camp inicial de velocitats irreal. Per a simulacions amb mitjans porosos el model *Hybrid* només s'hauria d'utilitzar quan s'habilités l'opció de *Maintain Constant Velocity Magnitud*.

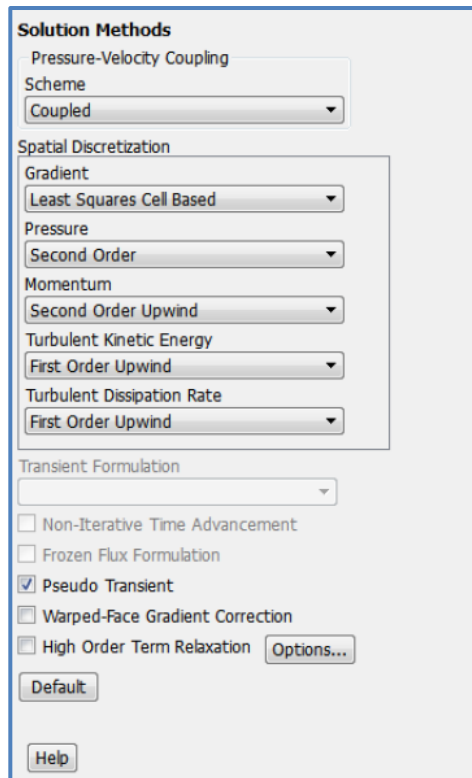


Figura 8.25. Solution Methods

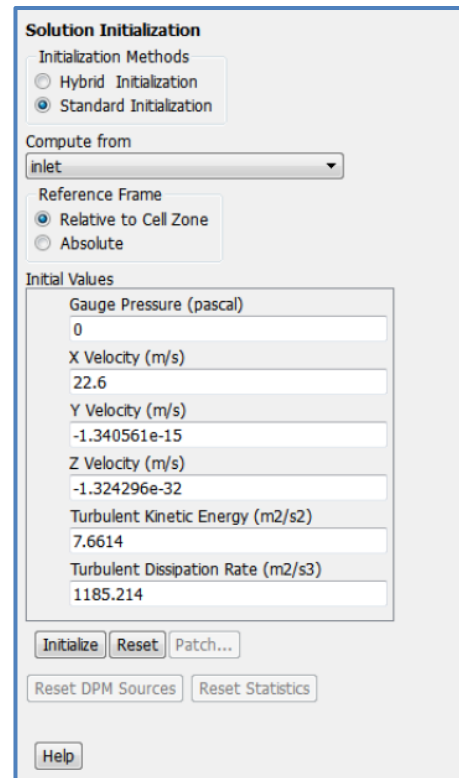


Figura 8.26. Solution Initialization

Un cop acabat el càlcul, al *postprocessing* es creen diferents contours per veure els vectors de velocitat i la pressió estàtica al pla $y=0$.

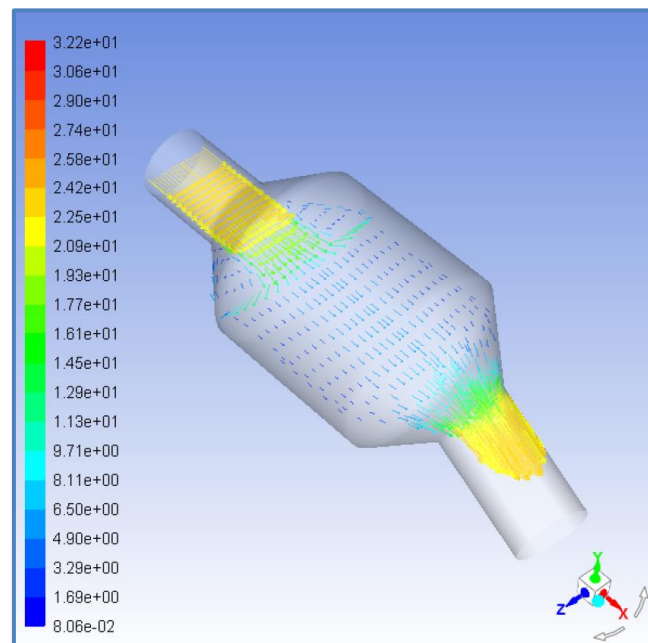


Figura 8.27. Vectors de velocitat

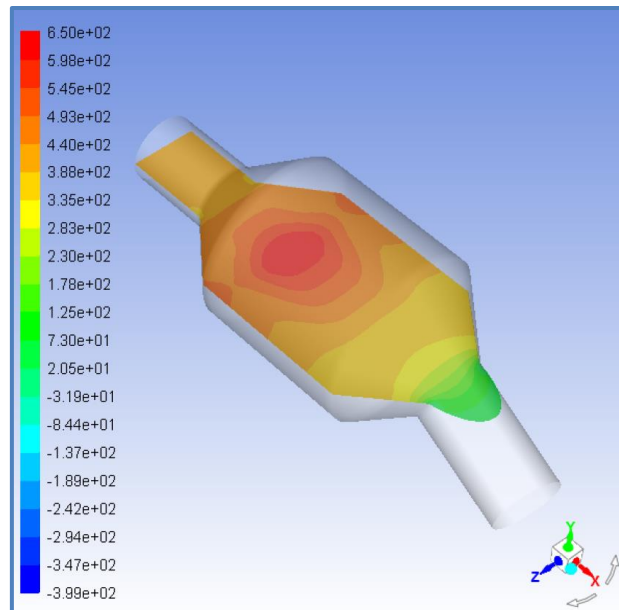


Figura 8.28. Contour de pressió estàtica

També es creen *Contours* de la velocitat en X als plans $x=95$, $x=130$ i $x=165$. Es pot observar com el perfil de velocitats es torna cada cop més uniforme conforme va avançant a través del mitjà porós. La velocitat és alta al centre, just abans que el nitrogen comenci a entrar al substrat i després decreix a mesura que avança pel mitjà porós. La zona amb una velocitat moderada (zona verda) augmenta amb el pas del nitrogen.

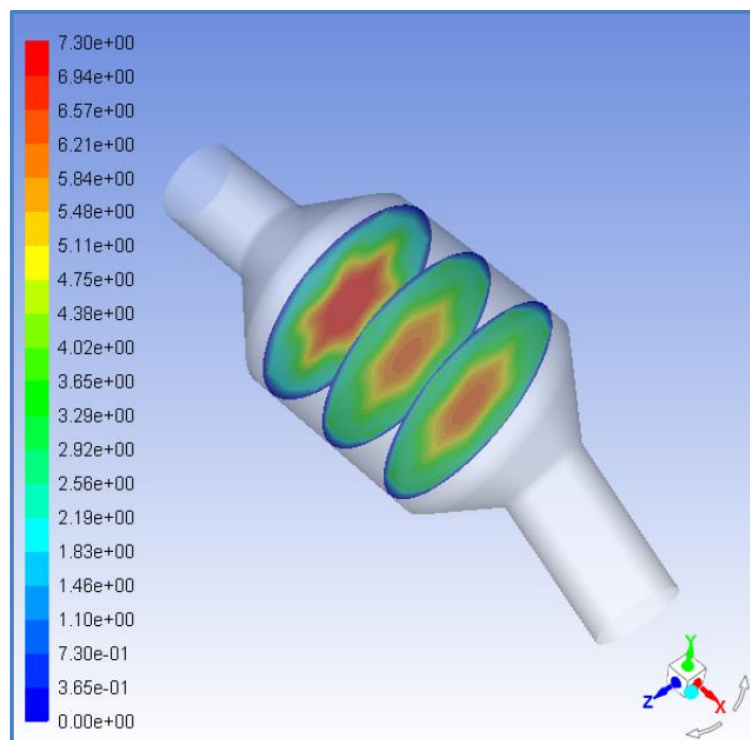


Figura 8.29. Contours de velocitat X

És important destacar que en els models amb *Porous Media*, tot i diferenciar les diferents zones de la Mesh, no es caracteritza cap interacció entre el fluid i el mitja porós, sinó que simplement es representa com una zona de fluid amb unes resistències hidràuliques.

8.3.4. Porous Media 2

En aquest exemple es tracta un model 2D amb una zona porosa entre dos altres ambients. Aquesta és la geometria bidimensional amb els *Named Selections* creades:

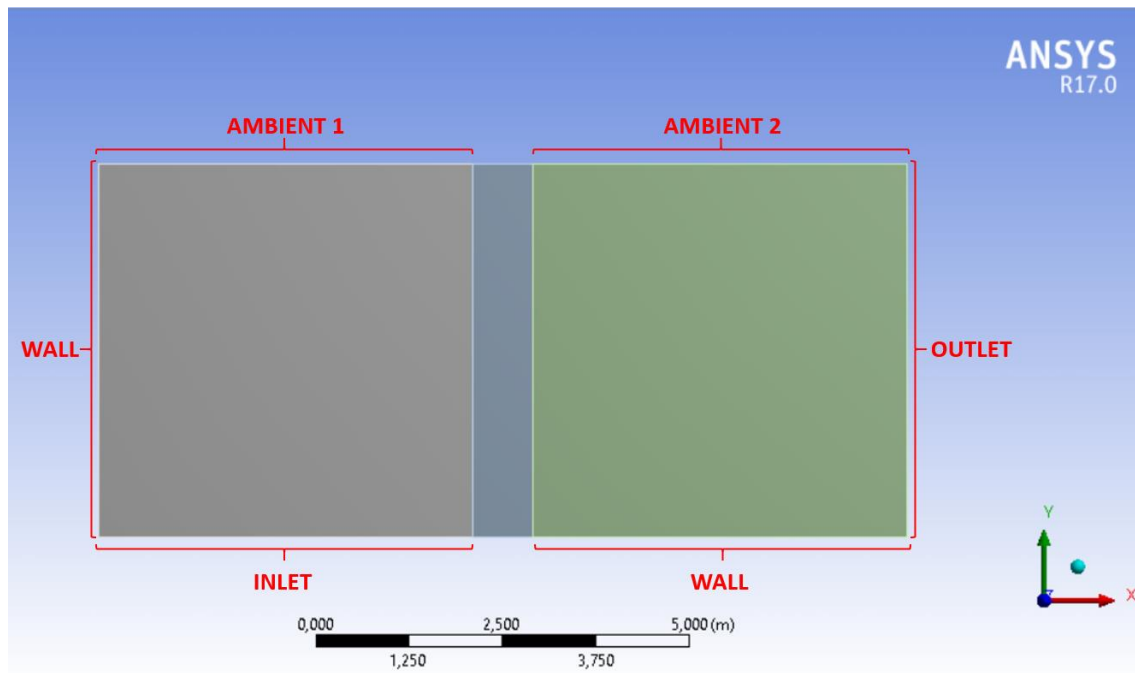


Figura 8.30. Geometria Porous Media 2

També es creen com a *named selections* les diferents *interfaces* que s'utilitzaran posteriorment al *setup*:

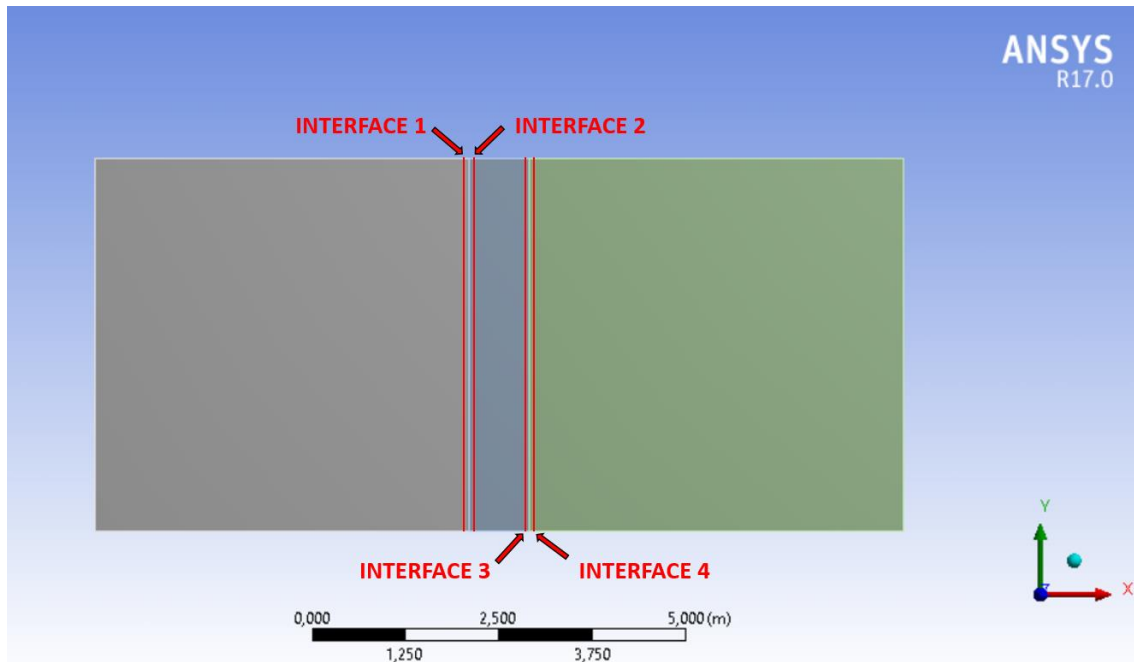


Figura 8.31. Interfaces Porous Media 2

Un cop el model es mallat s'obre el *setup (Fluent)*. A *Models* s'edita el *Multiphase Model* i el *Viscous Model*.

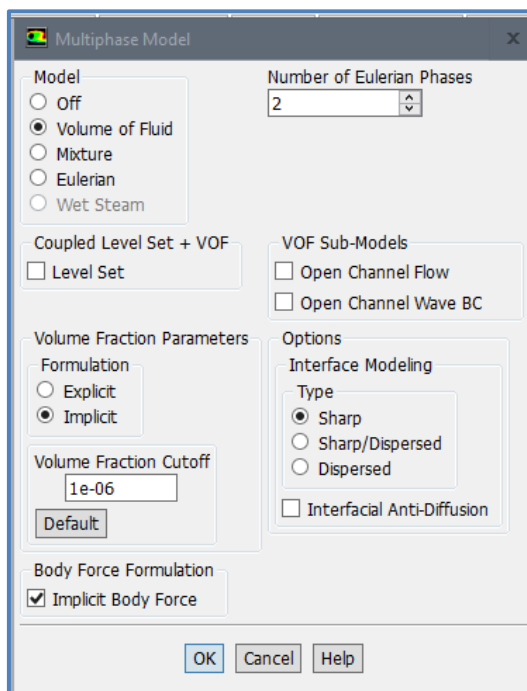


Figura 8.32. Multiphase Model

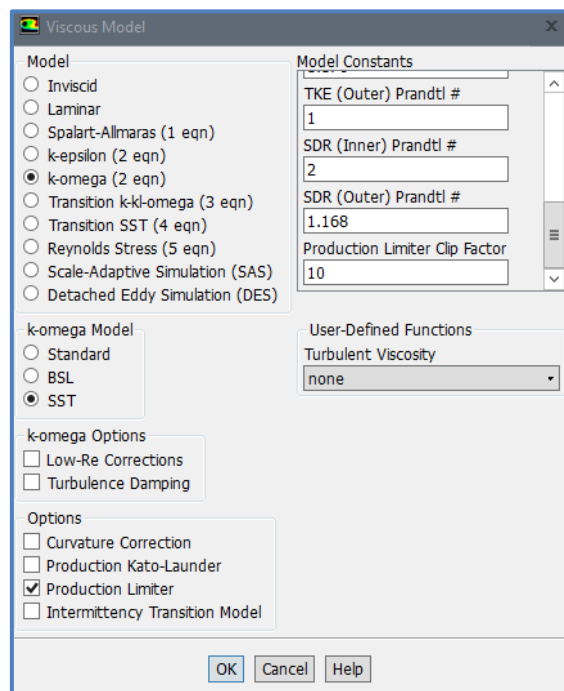


Figura 8.33. Viscous Model

A *Materials* s'escull *water-liquid* (aigua líquida) i *wood* (fusta) de la *data base*.

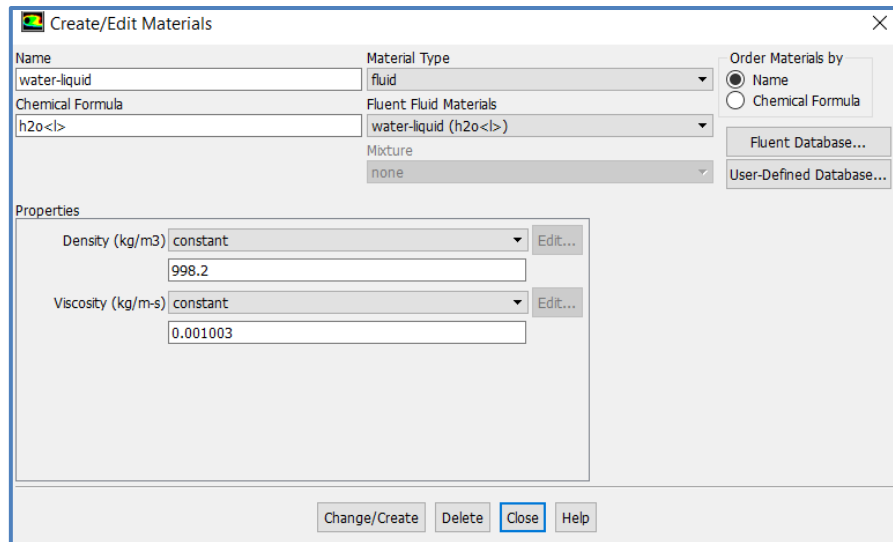


Figura 8.34. Create/Edit Materials (water-liquid)

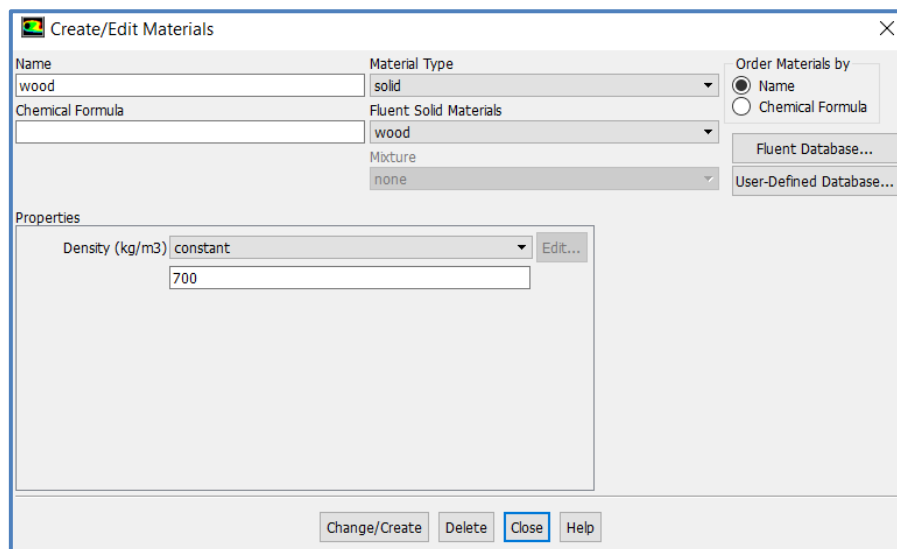


Figura 8.35. Create/Edit Materials (wood)

A Phases es declara *water-liquid* com a *Primary Phase* i *air* com a *Secondary Phase*.

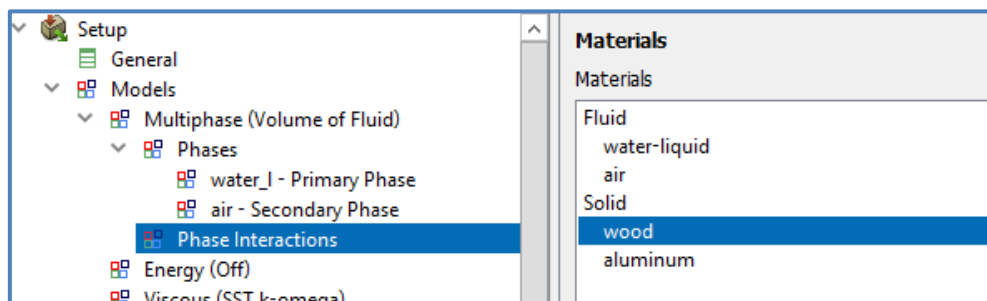


Figura 8.36. Phase Interactions

A *Phase Interaction* es declara el coeficient de tensió superficial.

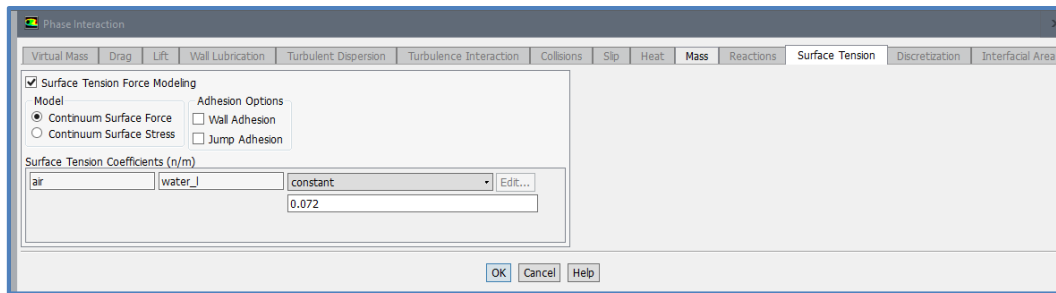


Figura 8.37. Phase Interaction (2)

A la *Cell Zone Condition* es declara la *inlet_zone* i l'*outlet_zone* com a *fluid* i *Mixture*. En canvi la *porous_zone* tot i ser també fluid es declara només com a *water-liquid*. En aquesta segona s'introdueix una porositat de 1 i un valor per la *Relative velocity resistance formulation* de $5e+07$ $1/m^2$.

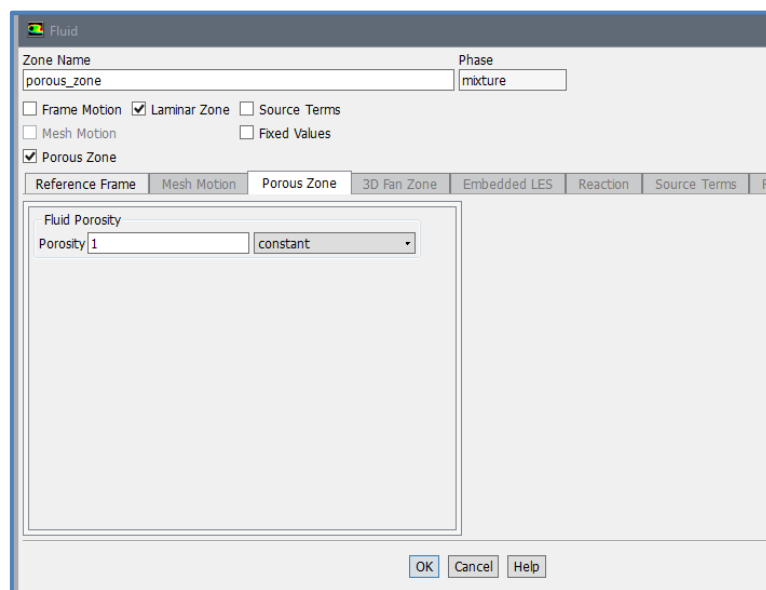


Figura 8.38. Fluid (porous zone – mixture)

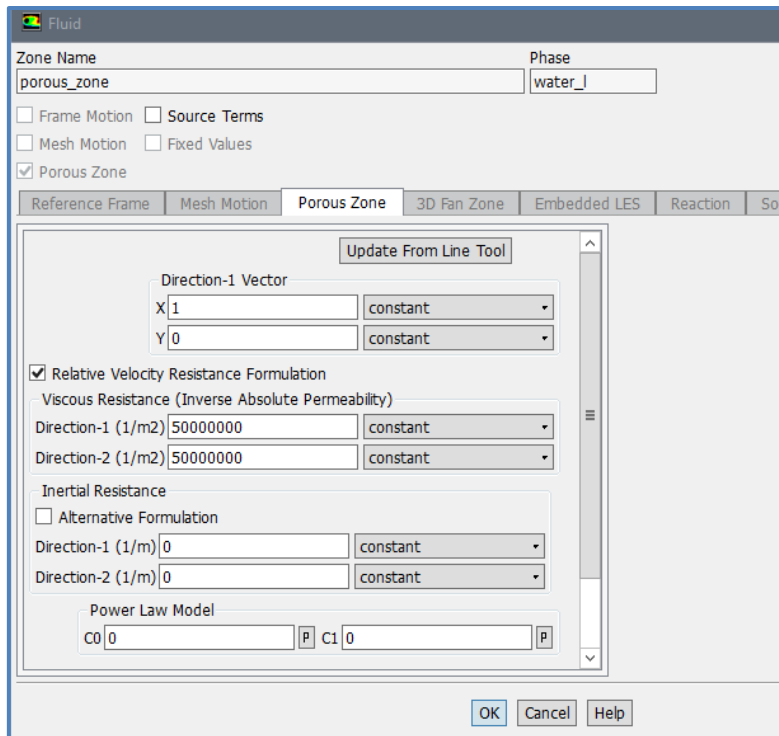
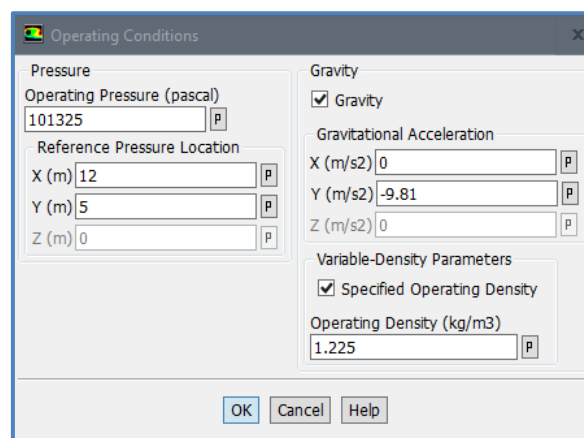


Figura 8.39. Fluid (porous zone – wàter-liquid)

Les *operating conditions* són les següents:



8.40. Operating Conditions

Es configuren les *Boundary Conditions* de la següent manera:

L'*ambient_1* com a fase *mixture* i *pressure-outlet*.

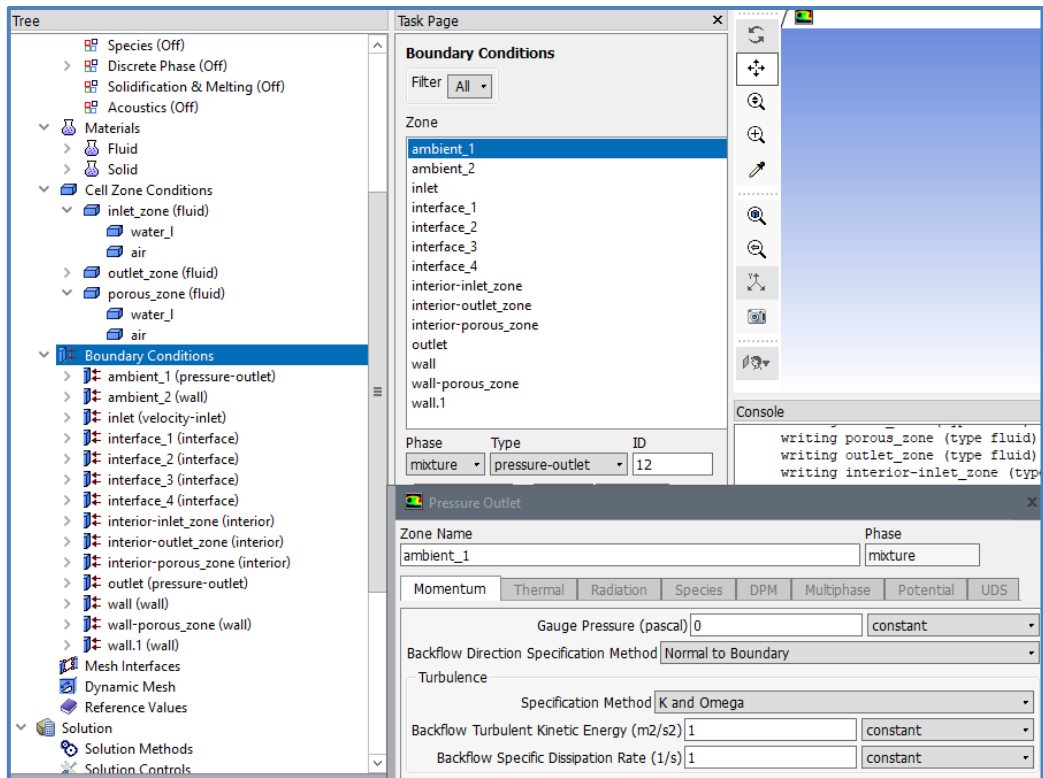


Figura 8.41. Pressure Outlet (ambient 1 – mixture)

I com a fase *air* amb un *Backflow Volume Fraction* de 1.

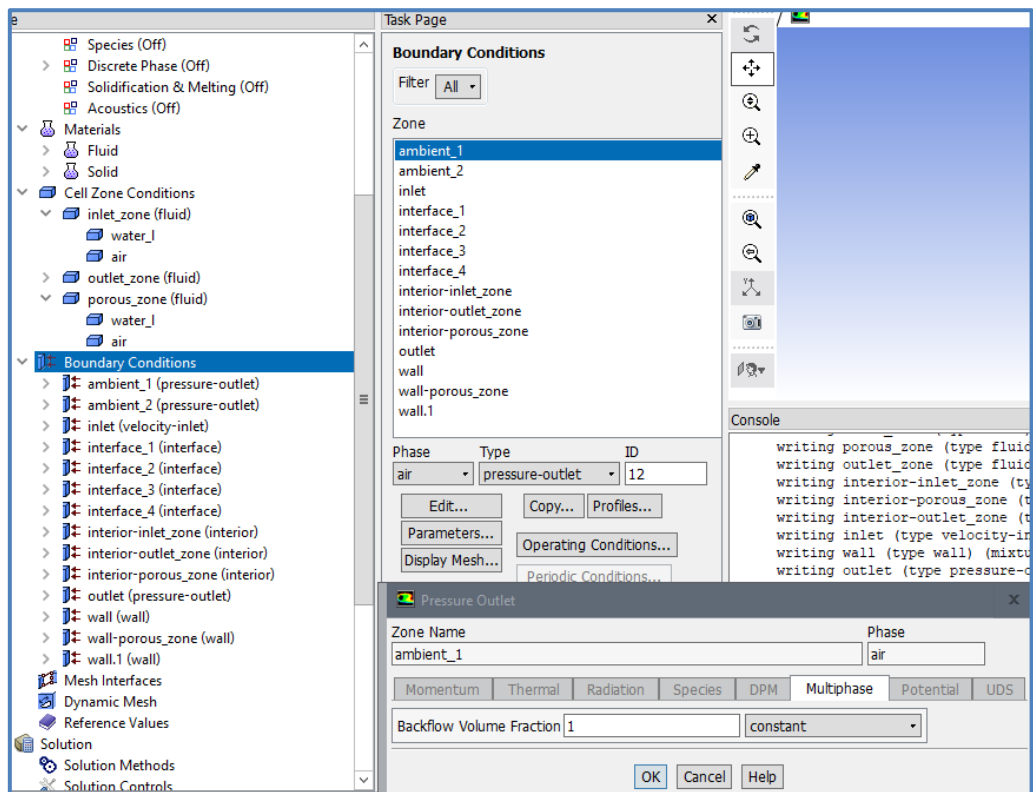


Figura 8.42. Pressure Outlet (ambient 1 – air)

I de la mateixa forma a l'ambient 2.

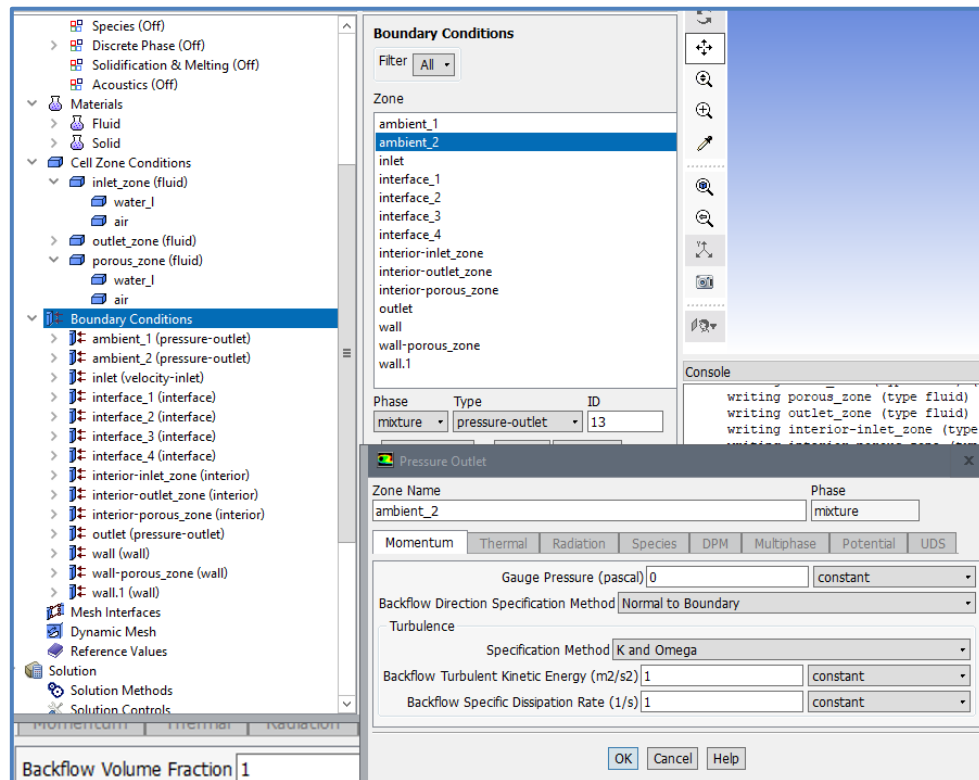


Figura 8.43. Pressure Outlet (ambient 2 – mixture)

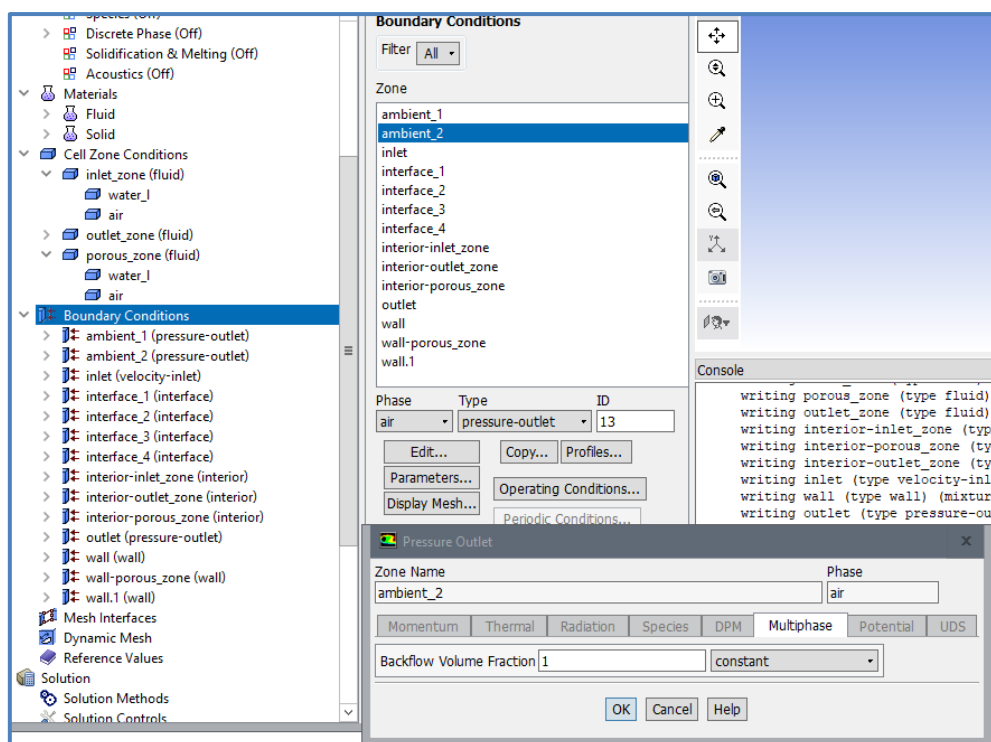


Figura 8.44. Pressure Outlet (ambient 2 – air)

L'inlet com a *mixture* i *velocity-inlet*.

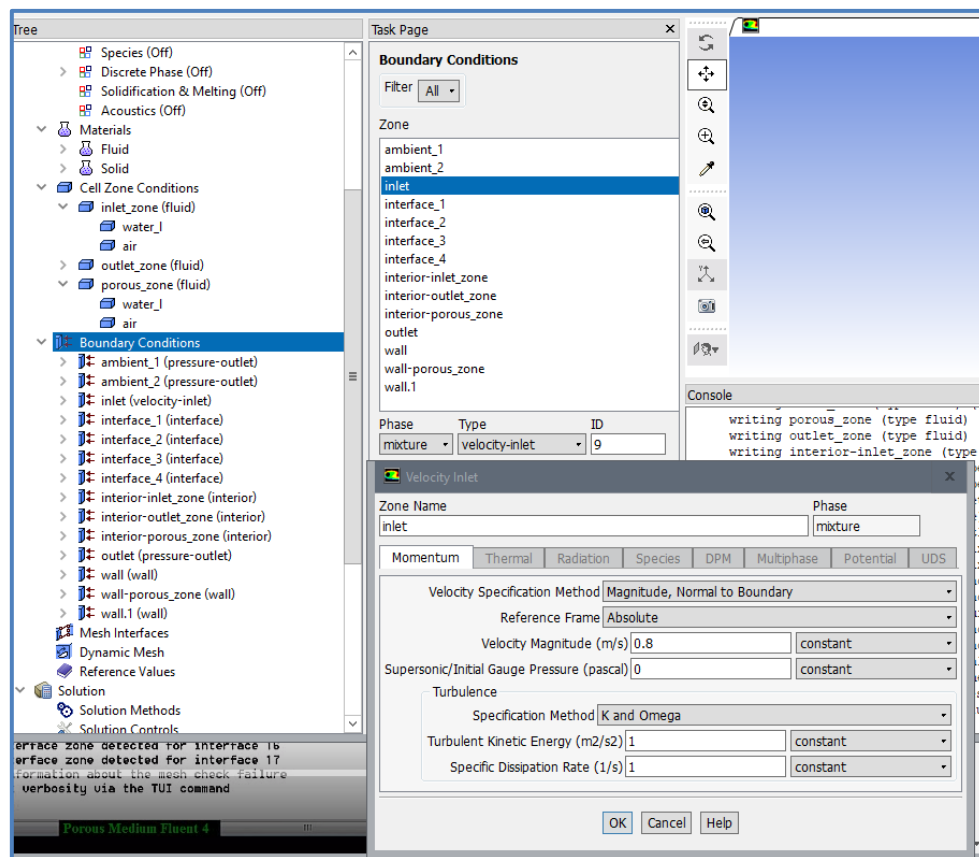


Figura 8.45. Velocity Inlet (mixture)

L'outlet per a *mixture* i *air* com a *pressure-outlet*, amb un *Backflow Volume Fraction* de 1.

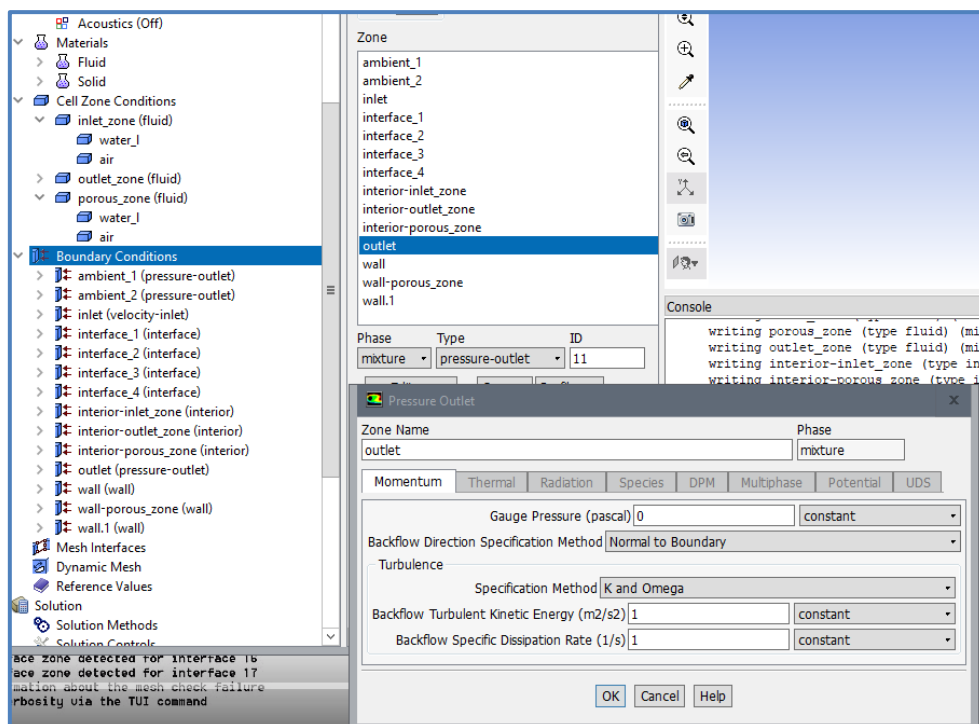


Figura 8.46. Pressure Outlet (mixture)

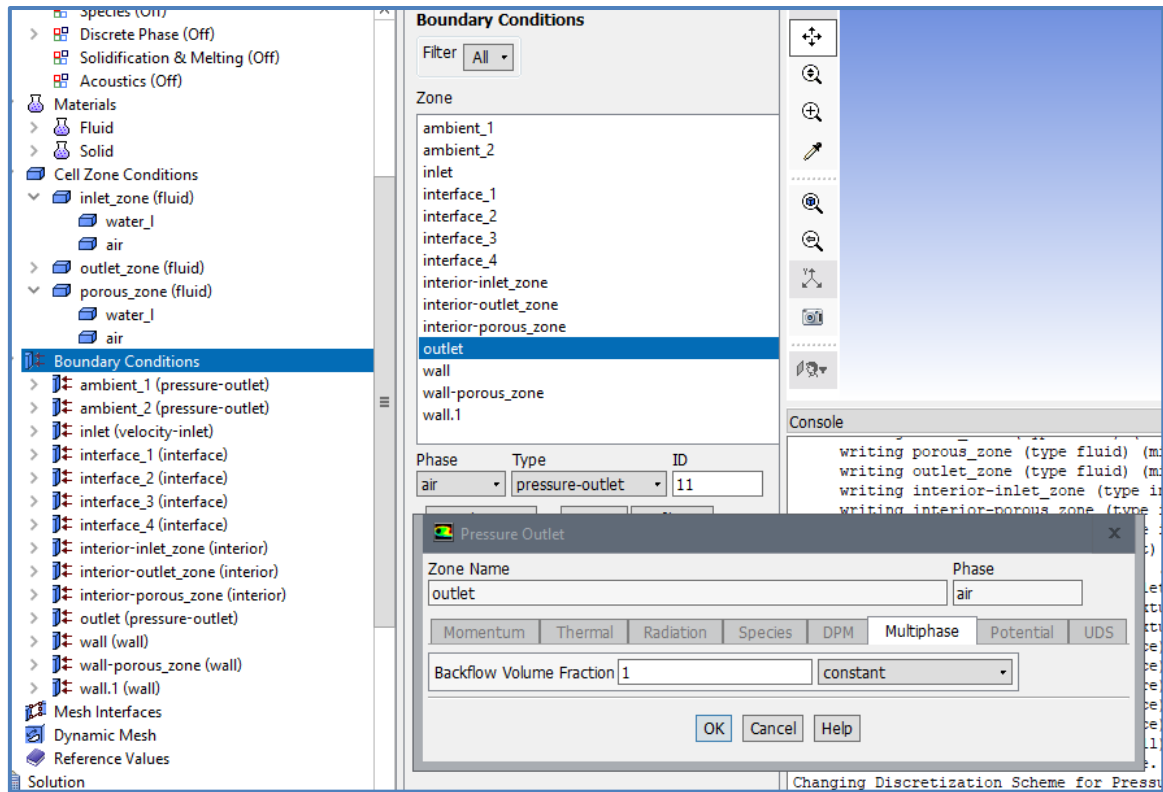


Figura 8.47. Pressure Outlet (air)

A *Boundary Conditions* es declaren les quatre *Interfaces* creades prèviament com a *type Interface*. I a *Mesh Interfaces* es creen les dos connexions que les connecten.

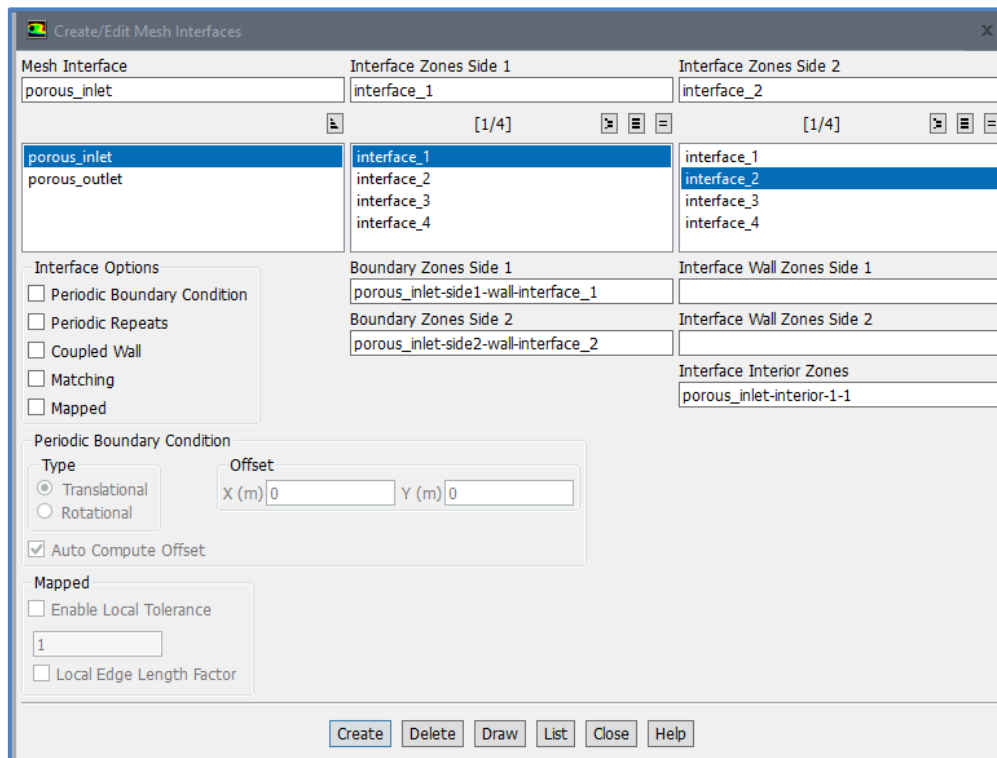
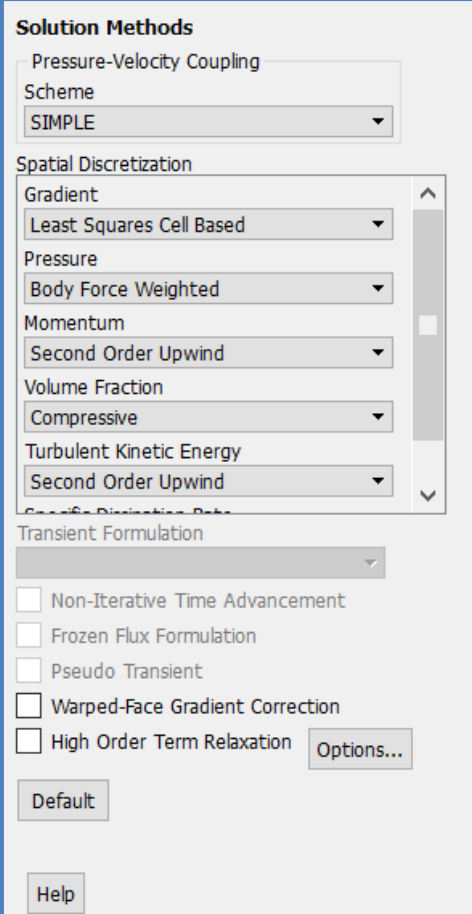


Figura 8.48. Create/Edit Mesh Interfaces

Mesh Interfaces	Source	Target
Porous_inlet	Interface_1	Interface_2
Porous_outlet	Interface_3	Interface_4

Figura 8.49. Mesh Interfaces

Es configuren els *Solution Methods* i la *Solution Initialization*.



Solution Methods

Pressure-Velocity Coupling
Scheme
SIMPLE

Spatial Discretization

Gradient
Least Squares Cell Based

Pressure
Body Force Weighted

Momentum
Second Order Upwind

Volume Fraction
Compressive

Turbulent Kinetic Energy
Second Order Upwind

Transient Formulation

☐ Non-Iterative Time Advancement

☐ Frozen Flux Formulation

☐ Pseudo Transient

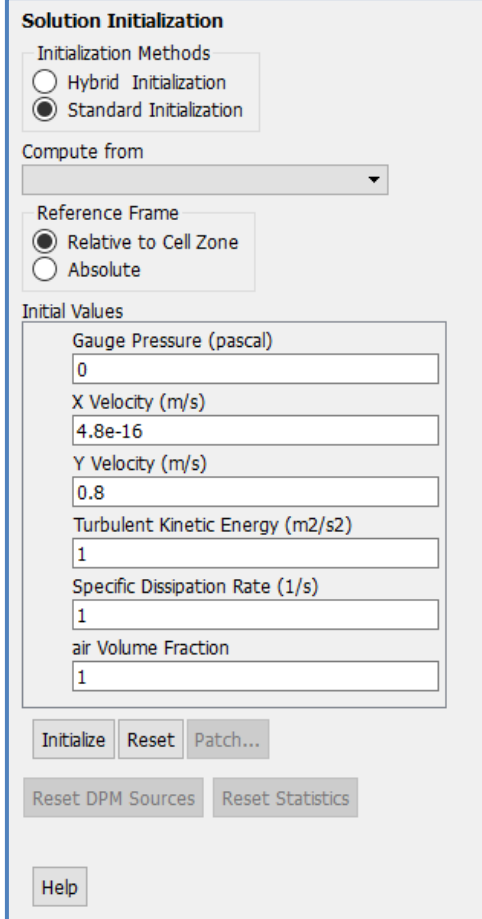
☐ Warped-Face Gradient Correction

☐ High Order Term Relaxation Options...

Default

Help

Figura 8.50. Solution Methods



Solution Initialization

Initialization Methods

☐ Hybrid Initialization

☒ Standard Initialization

Compute from

Reference Frame

☒ Relative to Cell Zone

☐ Absolute

Initial Values

Gauge Pressure (pascal)
0

X Velocity (m/s)
4.8e-16

Y Velocity (m/s)
0.8

Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)
1

Specific Dissipation Rate (1/s)
1

air Volume Fraction
1

Initialize Reset Patch...

Reset DPM Sources Reset Statistics

Help

Figura 8.51. Solution Initialization

Després d'inicialitzar i executar el càlcul es pot processar el resultat per tal de veure la fracció volumètrica d'aigua líquida com es mostra a continuació.

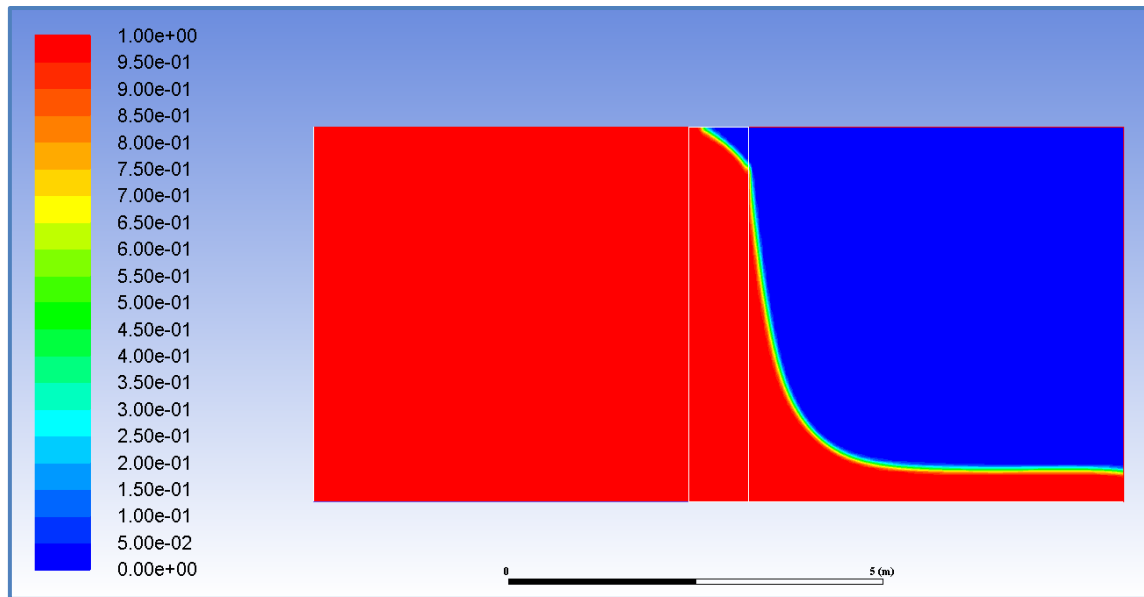


Figura 8.52. Fracció volumètrica

Es pot veure com el resultat és coherent amb els paràmetres introduïts.

8.3.5. Battery pack

En aquest exemple es simula un *battery pack* utilitzant el *MSMD Battery Model*. Tot i carregar un model ja creat, l'objectiu d'aquest exemple es veure com manipula els user-defined scalars (UDS) i les user-defined funcions (UDF), ja que es definirà la conductivitat elèctrica pel material actiu utilitzant un UDS i la conductivitat elèctrica pel material passiu utilitzant una UDF.

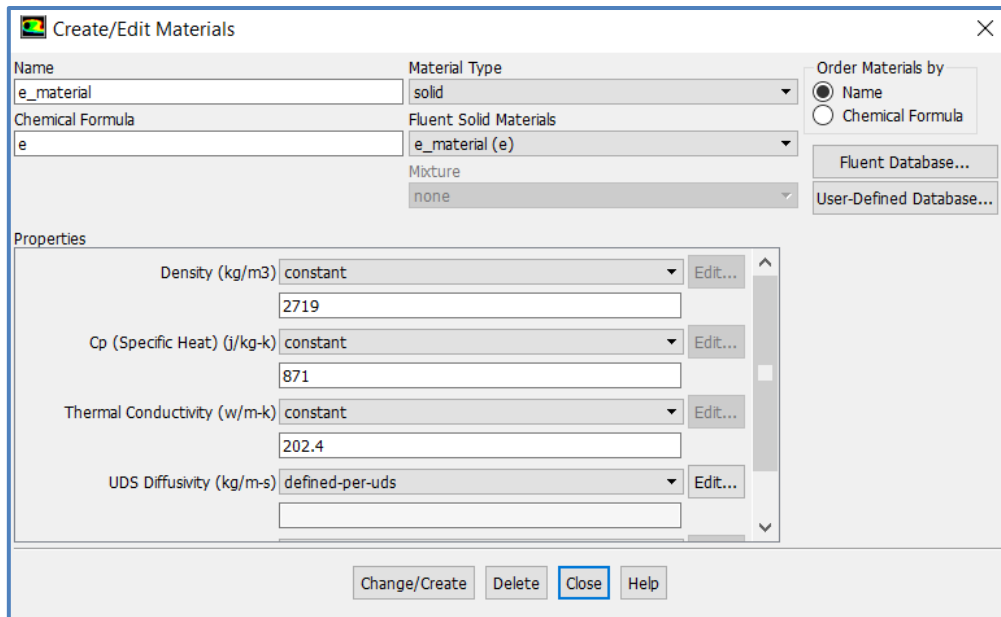
Per tal de carregar el *MSMD Battery Model* s'ha d'escriure a la *console*:

```
Define/models/addon-module
```

On apareixeran un llistat de diferents tipus de *Models*, però s'ha d'escollir el 8. *Dual-Potential MSMD Battery Model*. Durant la càrrega del *Model* també es carrega una llibreria amb totes les UDFs necessàries. Si no hi hagués cap *Model* creat, per tal d'obtenir aquesta llibreria d'UDFs s'hauria de compilar un arxiu .c i posteriorment carregar.

A *Setting Up Physics, Models, More* apareix seleccionable el *Dual Potential MSMD Batttery Model*, habilitant així totes les opcions que incorpora aquest *Model*.

Editant els materials es podran assignar els UDS i UDF corresponents. Per una banda editant el *e_material* es defineix la *UDS Diffusivity* com *defined-per-uds*, i editant els *UDS Diffusion Coefficients* (uds-0 i uds-1) es defineixen constants a $1e+06$ kg/ms.



Create/Edit Materials

Name: Material Type:
 Chemical Formula: Fluent Solid Materials:
 Mixture:

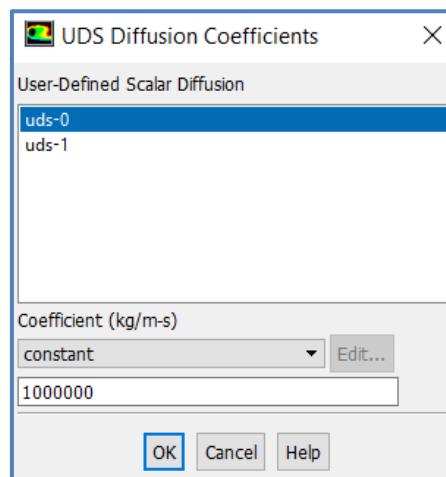
Order Materials by:
☒ Name
☐ Chemical Formula

Fluent Database...
 User-Defined Database...

Properties

Density (kg/m ³)	<input type="text" value="constant"/>	<input type="button" value="Edit..."/>
	<input type="text" value="2719"/>	
Cp (Specific Heat) (J/kg-K)	<input type="text" value="constant"/>	<input type="button" value="Edit..."/>
	<input type="text" value="871"/>	
Thermal Conductivity (W/m-K)	<input type="text" value="constant"/>	<input type="button" value="Edit..."/>
	<input type="text" value="202.4"/>	
UDS Diffusivity (kg/m-s)	<input type="text" value="defined-per-uds"/>	<input type="button" value="Edit..."/>
	<input type="text"/>	

Figura 8.53. Edit e_material



UDS Diffusion Coefficients

User-Defined Scalar Diffusion

Coefficient (kg/m-s)

Figura 8.54. UDS Diffusion Coefficients

D'altra banda, al *busbar_material* es defineix la *UDS Diffusivity* com a *user-defined*, i editant les *User-Defined Functions* es selecciona *battery_e_cond::msmdbatt*, la llibreria que conté les UDFs.

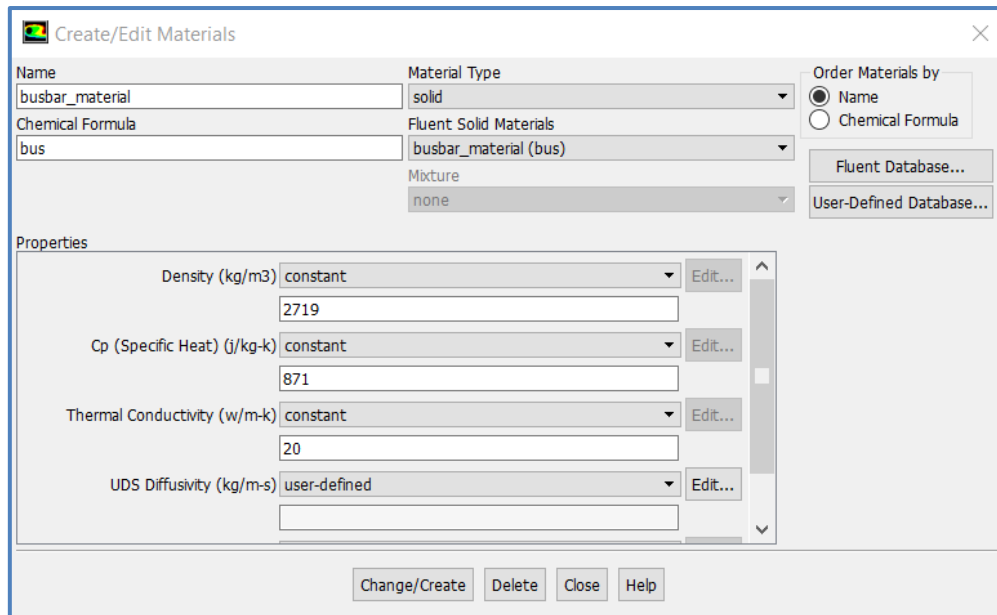


Figura 8.55. Edit busbar_material

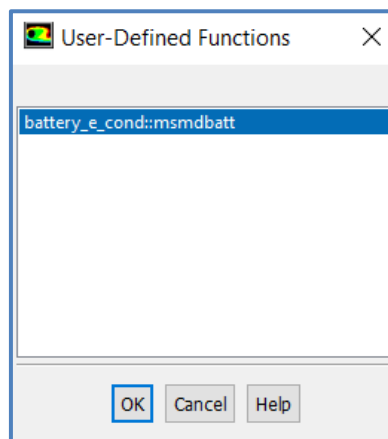


Figura 8.56. User-Defined Functions

8.3.6. Ethanol adsorption

Aquest exemple es basa en la investigació de *Jribi, Skander, Takahiko Miyazaki, Bidyut Baran Saha, Shigeru Koyama, Shinnosuke Maeda, i Tomohiro Maruyama* [9], que simula el procés d'adsorció d'etanol en AC. Aquest paper es centra bàsicament en els paràmetres per configurar el *setup* i els tipus de models que s'utilitzen. A l'estudi es realitzen simulacres de transferència de calor i massa. Les proves experimentals sobre les quals es basa el *paper* es van dur a terme en un bescanviador de calor amb tubs de coure amb aletes que contenen el AC, en aquest cas del tipus *Maxsorb III*, envoltats de refrigerant i aigua de refrigeració. L'AC es empaquetat al bescanviador de calor, amb tubs amb aletes de 700 mm. L'aigua de refrigeració circula dintre del tub i el gas etanol rodeja el bescanviador de calor. Com que l'adsorbent és axisimètric la geometria es redueix a 2D. El domini del càlcul es limita a l'espai entre dos aletes, ja que existeixen plans de simetria, com es mostra a la següent figura.

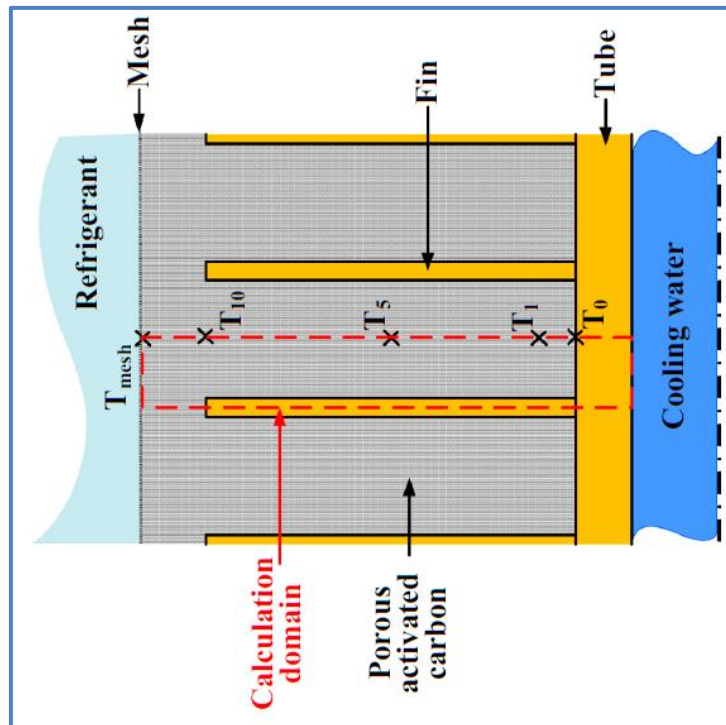


Figura 8.57. Domini de la geometria

Si el volgués extrapolar la zona a considerar a una geometria 2D que l'Ansys pugui processar s'hauria de crear el següent model bidimensional amb les següents *Named Selections*.

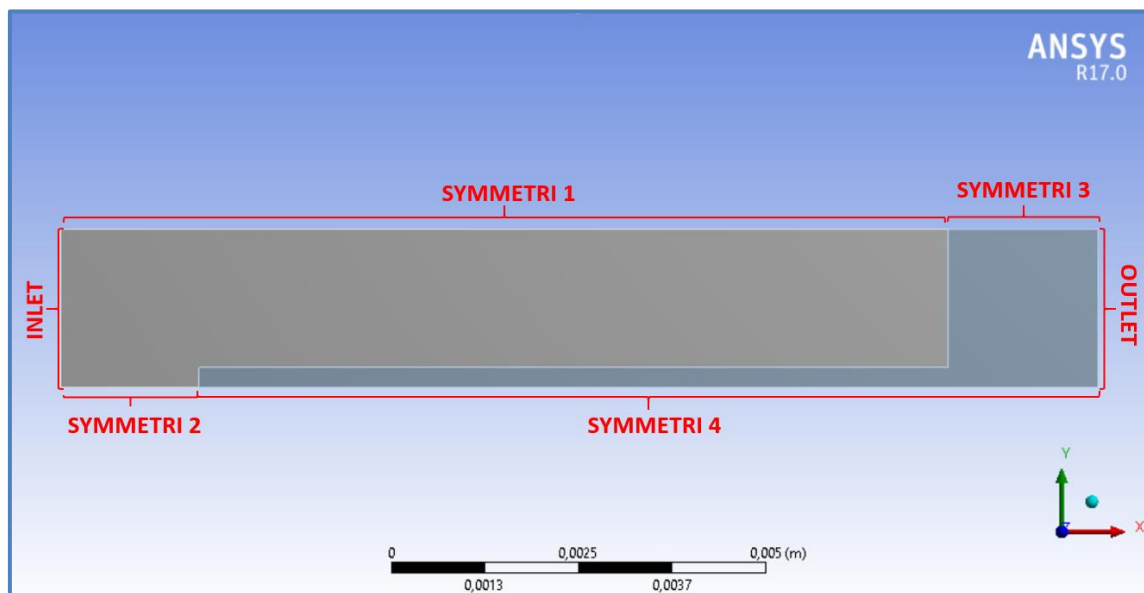


Figura 8.58. Geometria Ethanol adsorption

També s'haurien de crear dos *Named Selections* per crear una *Mesh Interface*.

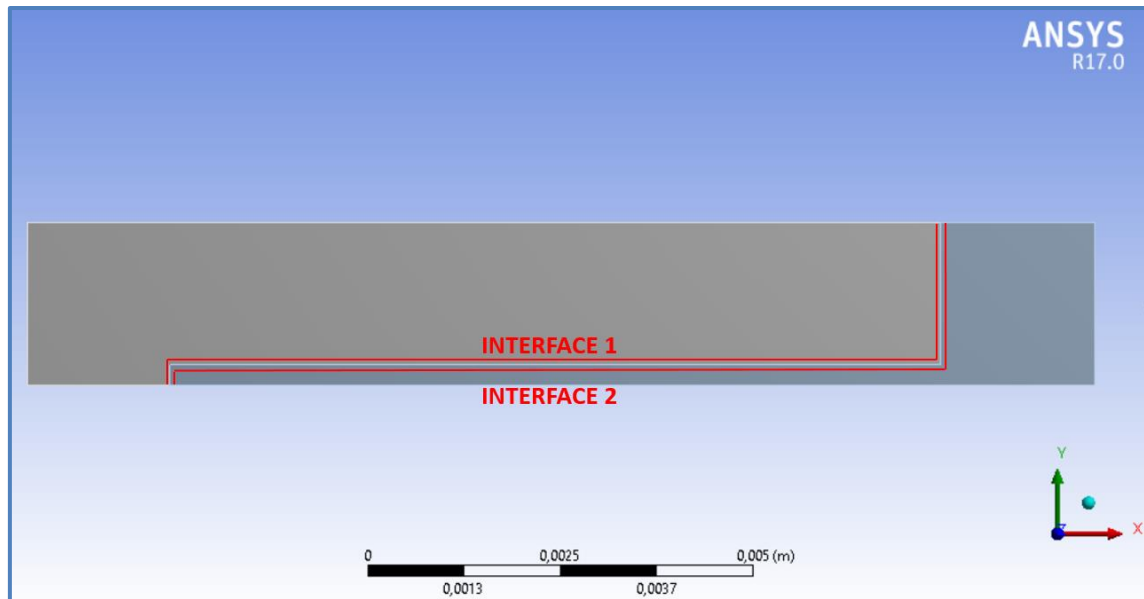


Figura 8.59. Interfaces Ethanol adsorption

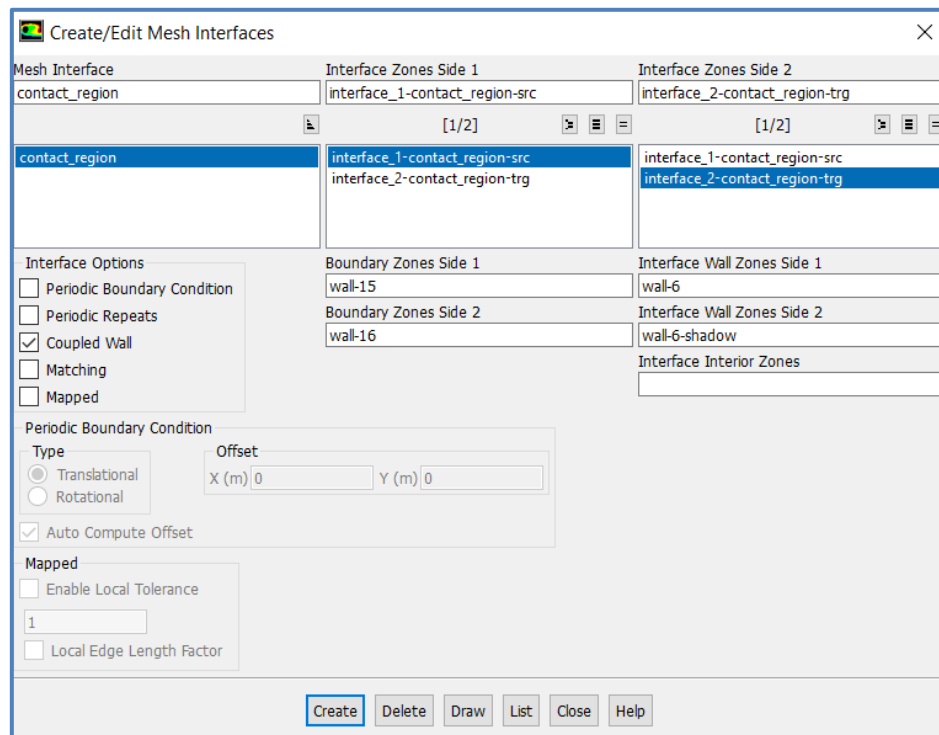


Figura 8.60. Create/Edit Mesh Interfaces

El rati d'adsorció d'etanol al AC Maxsorb III l'han aproximat a partir de dades experimentals utilitzant el model Linear Driving Force (LDF). D'altra banda, el procés d'adsorció s'ha aproximat emprant l'isoterma de Dubinin-Astakhov (D-A). També han tingut en compte les equacions de conservació de moment, massa i energia.

Fent referencia als resultats publicats al *paper*, l'adsorbent estava inicialment a una pressió d'equilibri de 0,95 kPa. Després es connecta un evaporador que conté vapor saturat d'etanol inicialment a 8,7 kPa. La pressió de l'adsorbent va augmentar bruscament fins els 5,95 kPa i després d'això va seguir la pressió del evaporador tal com es mostra a

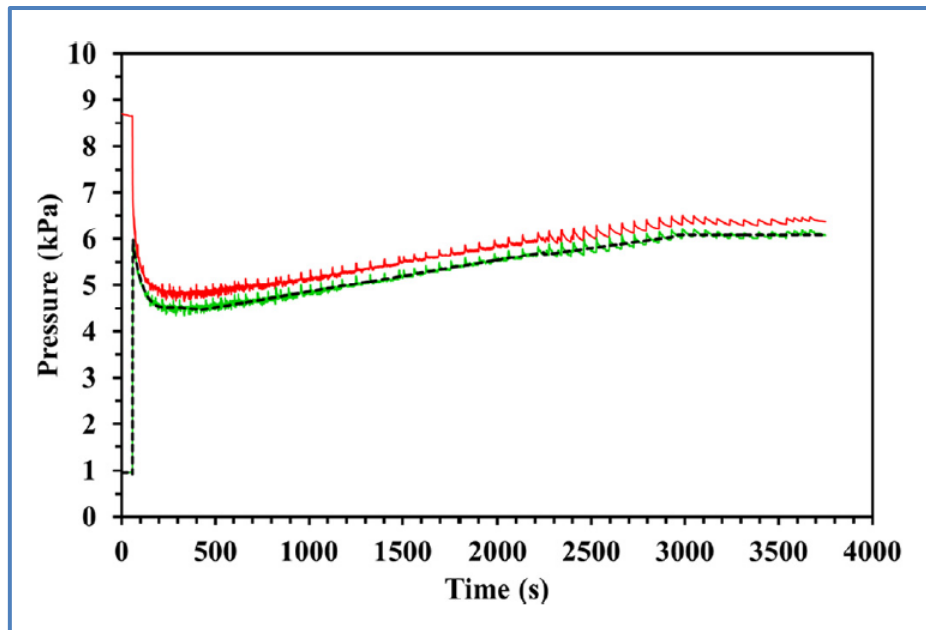


Figura 8.61. Pressure vs. Time

La pressió del evaporador va disminuir degut a la evaporació del refrigerant. Posteriorment, la pressió a l'evaporador va augmentar a mesura que la calor latent de l'evaporació era eliminada per un circuit d'aigua fixat a 20°C.

Pel que fa a la temperatura del refrigerant entrant a la simulació, s'associa a la temperatura del costat de la malla. La temperatura va augmentar al inici degut a la compressió del gas etanol causat per la elevació de pressió. Després va disminuir a mesura que la pressió disminuïa i la calor es dissipava als voltants. Després d'això va tornar a augmentar i no va tornar a disminuir fins que la calor de l'adsorbent va ser eliminada per l'aigua de refrigeració com es mostra a

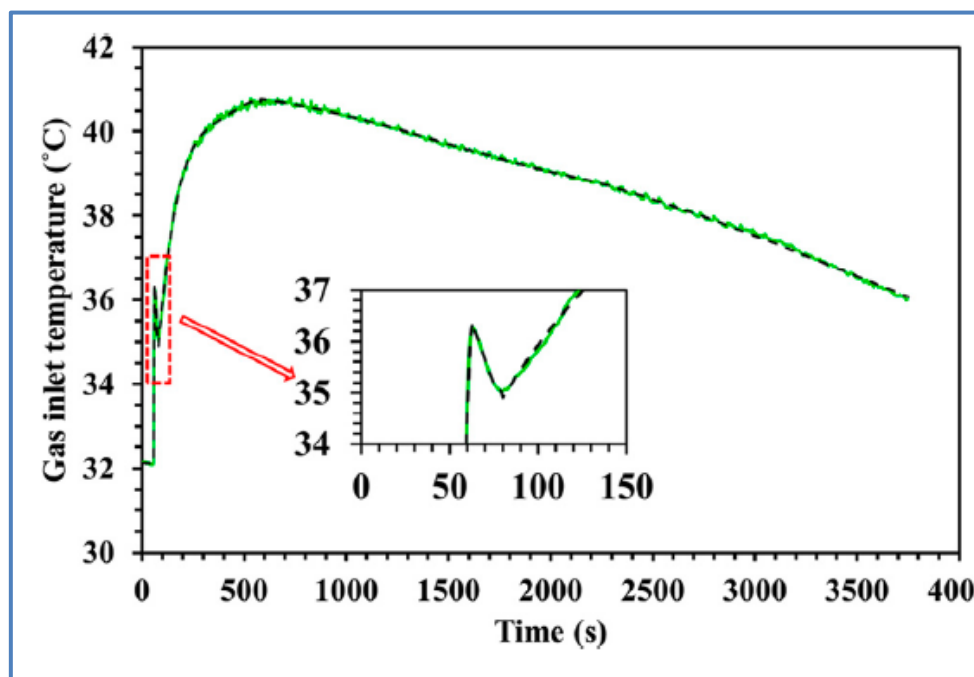


Figura 8.62. Gas inlet temperature vs. Time

Tant la pressió d'adsorció experimental com la temperatura de la fase gasosa van ser implementades a l'Ansys amb UDFs.

L'aigua de refrigeració a casi 30 °C va fluir pel tub a 3 l/min. Just després de connectar l'adsorbent al evaporador, les temperatures d'entrada i sortida van augmentar considerablement com es mostra a

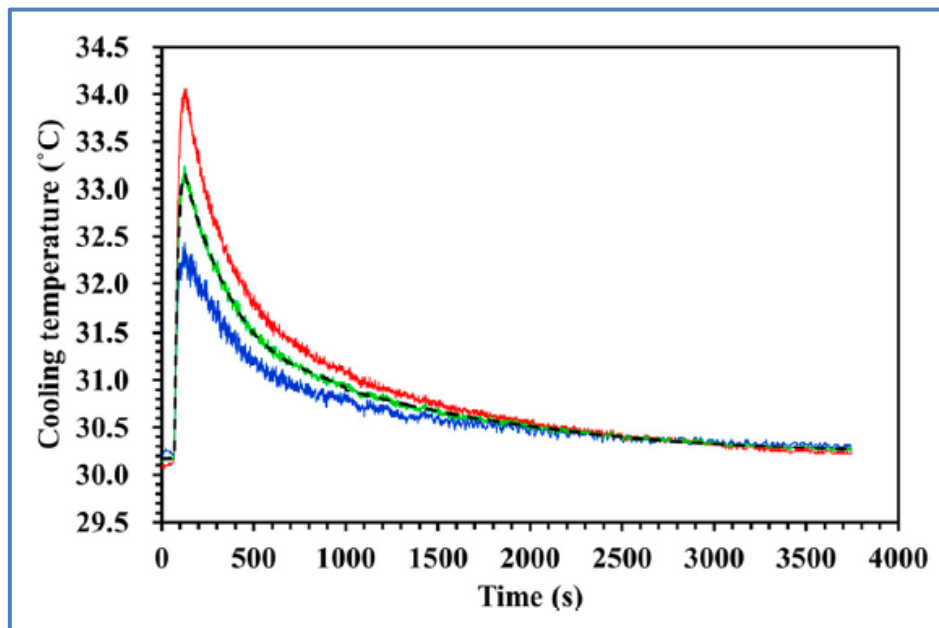


Figura 8.63. Temperatures de l'aigua refrigerant (verd), inlet (blau) i outlet (vermell) vs. Time

La temperatura de l'aigua, estimada com el promig de les temperatures d'entrada i sortida, es va inserta al Fluent com la temperatura lliure de la corrent lliure utilitzant una UDF.

El coeficient de transferència de calor per convecció es va avaluar amb la correlació de *Dittus i Boelter*.

$$Nu = 0,023 Re^{0,8} Pr^n \quad (8.12.)$$

n=0,4 per un escalfament de fluid

n=0,3 per un refredament del fluid

Límits de validesa de l'expressió:

- 0,7 < Pr < 100
- Re > 1000
- L/D > 60

8.4 Exemples d'UDFs

Tot i poder interpretar l'arxiu UDF_SIMULACIO.c de forma correcta i assignar cada paràmetre a la *dialogue box* corresponent, a l'hora d'inicialitzar rebia l'error de "*received a fatal signal (Segmentation fault)*". Tot i que aquest error pot provenir de múltiples llocs, el més probable és que fos degut al codi introduït. Degut a això vaig decidir afrontar el problema per parts i fer exemples més simples amb les diferents ordres de MACRO (ADJUST, SOURCE...) per separat, per tal de veure com processa el codi, les variables, l'entorn... i arribar als errors.

8.4.1 DEFINE_PROFILE

Per tal de comprovar simplement que el software era capaç d'interpretar les ordres MACROS vaig agafar un exemple del *ANSYS Fluent Tutorial Guide* [2] on es modificava el perfil de la velocitat d'entrada creant una paràbola. Aquest codi va ser aplicat sobre una geometria 2D que es va fer, un colze amb una entrada i sortida de 100 mm. El codi a introduir és el següent:

```

/*****
udfexample.c
UDF for specifying steady-state velocity profile boundary condition
*****/
#include "udf.h"
DEFINE_PROFILE(inlet_x_velocity, thread, position)
{
    real x[ND_ND]; /* this will hold the position vector */
    real y, h;
    face_t f;
    h = 0.1; /* inlet height in m */
    begin_f_loop(f, thread)
    {
        F_CENTROID(x, f, thread);
        y = 2.*(x[1]-0.5*h)/h; /* non-dimensional y coordinate */
        F_PROFILE(f, thread, position) = 0.1*(1.0-y*y);
    }
    end_f_loop(f, thread)
}

```

Figura 8.64. udfexample.c

Un cop va ser interpretat, a les condicions de contorn del inlet va ser possible seleccionar la *udf inlet_x_velocity* per a la velocity magnitude. Després de ser inicialitzat i calculat, a *Results (CFD-Post)* es va configurar la visió de *Contour* per a la velocitat.

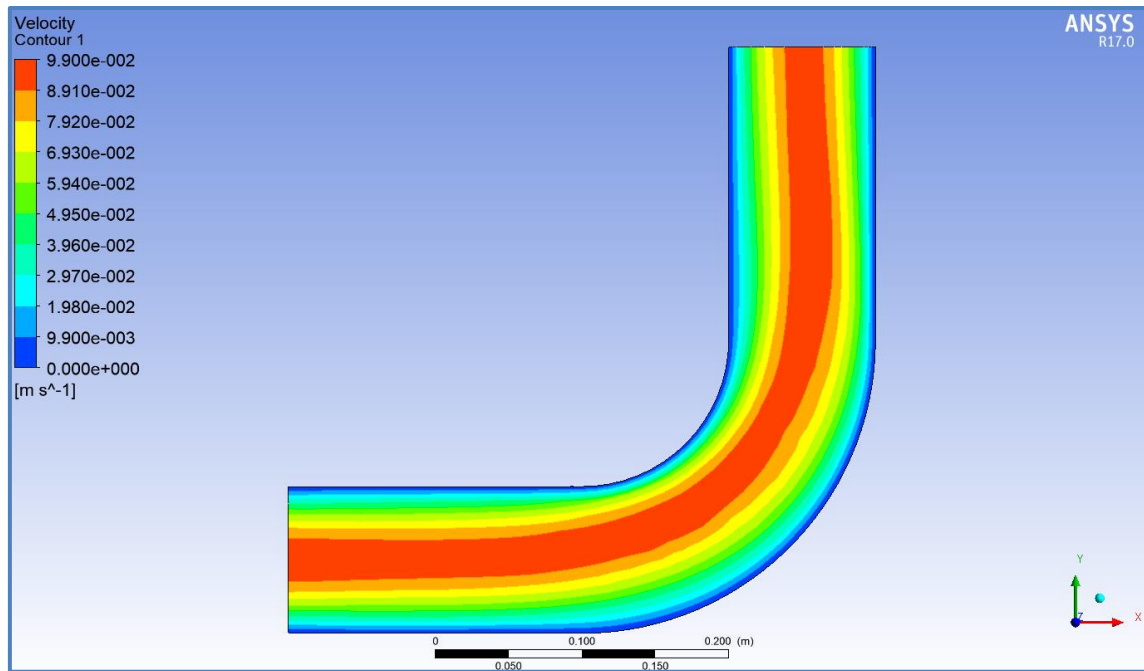


Figura 8.65. Velocity profile

Com s'observa, els majors valors de velocitat s'observen a la part central i els menors a les parets, tal i com està definit al codi introduït.

D'aquest exemple es pot extreure primerament que les ordres de MACRO són correctament interpretades. També és important observar com es desenvolupa el codi i com són definides les variables. En aquest cas `DEFINE_PROFILE(inlet_x_velocity, thread, position)` està compost pel tipus d'ordre (PROFILE), nom de la UDF (`inlet_x_velocity`) i els dos arguments necessaris pel tipus d'ordre PROFILE (`thread` i `position`). Com que els dos són arguments necessaris per la ordre es pot veure com no són declarats com a variables.

8.4.2. DEFINE_ADJUST

Per tal de veure el funcionament de la ordre MACRO `DEFINE_ADJUST` es va fer un codi on l'objectiu era que retornés el doble de la temperatura. La temperatura era una constant (300 K) i per tant la variable retornada també ho seria. Aquest codi es va aplicar sobre el mateix model que a l'exemple 9.4.1. però aquest cop a la velocitat de l'*inlet* se li va assignar un valor constant. El codi introduït és el següent:

```

#include "udf.h"
DEFINE_ADJUST(temperature_x2,d)
{
  Thread *t;
  real tempx2=0.;
  cell_t c;
  thread_loop_c(t,d)
  {
    begin_c_loop(c,t)
    tempx2 = C_T(c,t)*2;
    end_c_loop(c,t)
  }
}

```

Figura 8.66. temperature_x2.c

És important que per a aquelles UDF on apareix l'ordre ADJUST, un cop interpretat el codi, lligar la funció a *User defined, Function Hooks*.

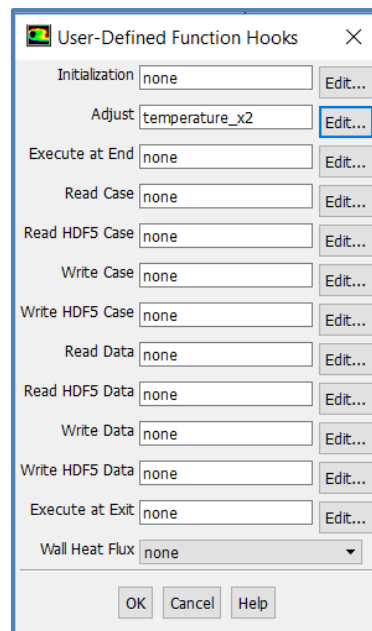


Figura 8.67. Dialogue box de User-Defined Function Hooks

Al acabar el càlcul a la *console* es pot veure el següent text:

```

Iter continuity x-velocity y-velocity energy      k          epsilon    time/iter
! 41 solution is converged
41 9.9605e-04 1.3089e-05 2.8532e-05 8.6033e-08 9.6079e-05 2.3186e-04 0:00:00 459
temperature x2: 600

```

Es pot observar que ha necessitat 41 iteracions per a convergir i es confirma que el càlcul de la temperatura s'ha executat de forma correcta (temperature x2: 600).

8.4.3. DEFINE_SOURCE

És important entendre com interpreta el software una UDF amb l'ordre DEFINE_SOURCE. L'Ansys Fluent crida la funció i crea com un loop global a les cel·les. La funció hauria de calcular el *source term* i retornar-ho al *solver*.

En aquest exemple es tractarà un model 2D d'una canonada de 4 metres de llarg i 2 d'ample. Serà modelat utilitzant un contorn simètric respecte el centre. Metall líquid entrarà per l'Inlet a 1 mm/s a una temperatura de 290 K. Després que el metall s'hagi desplaçat 0,5 m pel conducte s'exposa a una paret, introduïda a una temperatura constant de 280 K, que el refredarà. Per tal de simular el refredament del metall es recorre a la *source term* en quant el metall baixa de 288 K. La UDF que modelarà aquesta *source term* serà *cell_x_source.c*.

```

/*****
UDF that adds momentum source term and derivative to duct flow
*****/
#include "udf.h"
#define CON 20.0
DEFINE_SOURCE(cell_x_source, cell, thread, dS, eqn)
{
    real source;
    if (C_T(cell, thread) <= 288.)
    {
        source = -CON*C_U(cell, thread);
        dS[eqn] = -CON;
    }
    else
    {
        source = dS[eqn] = 0.;
    }
    return source;
}

```

Figura 8.68. *cell_x_source.c*

La geometria sobre la qual s'executarà la simulació, amb les *Named Selections* creades és la següent:

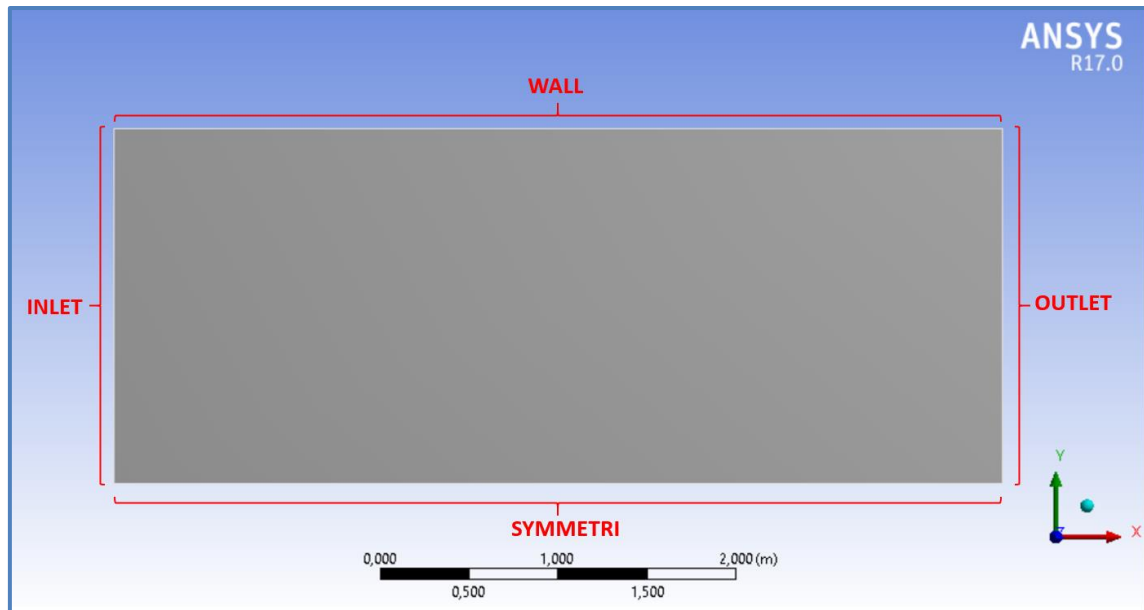


Figura 8.69. Geometria DEFINE_SOURCE

Al *setup*, tant interpretant com compilant l'arxiu *cell_x_source.c* es carrega de forma correcta la funció. L'assignació de la UDF es farà a *Cell Zone Conditions*, *Surface_body*, i habilitant l'opció de *Source Terms*, *X Momentum*.

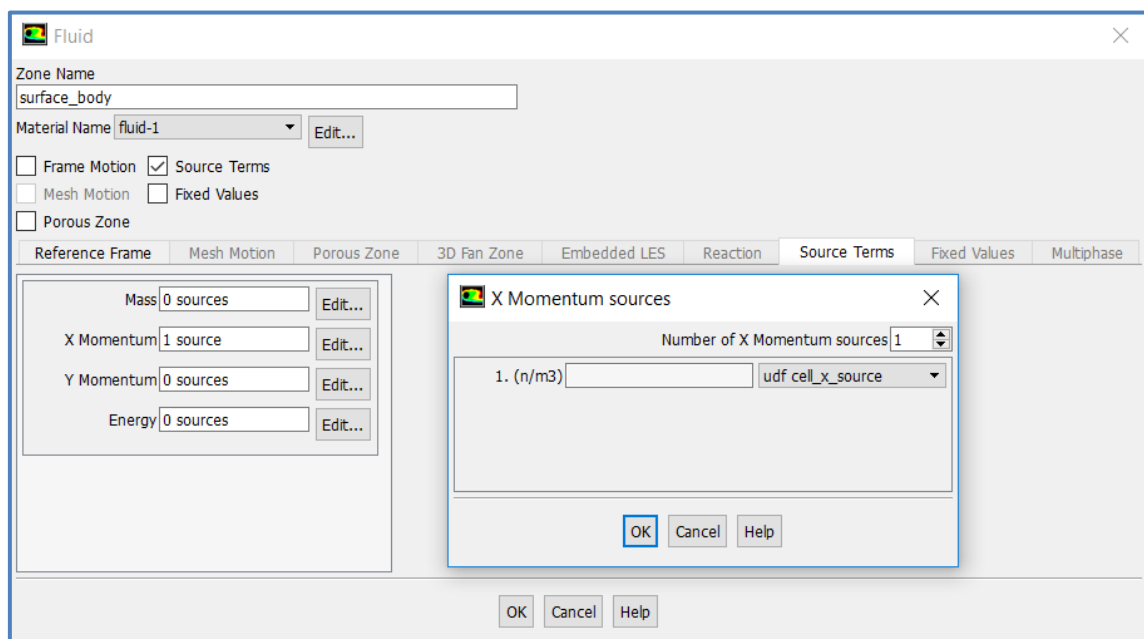


Figura 8.70. Fluid – Surface_body

Després d'inicialitzar i calcular s'obre el CFD-Post per tal de visualitzar els resultats.

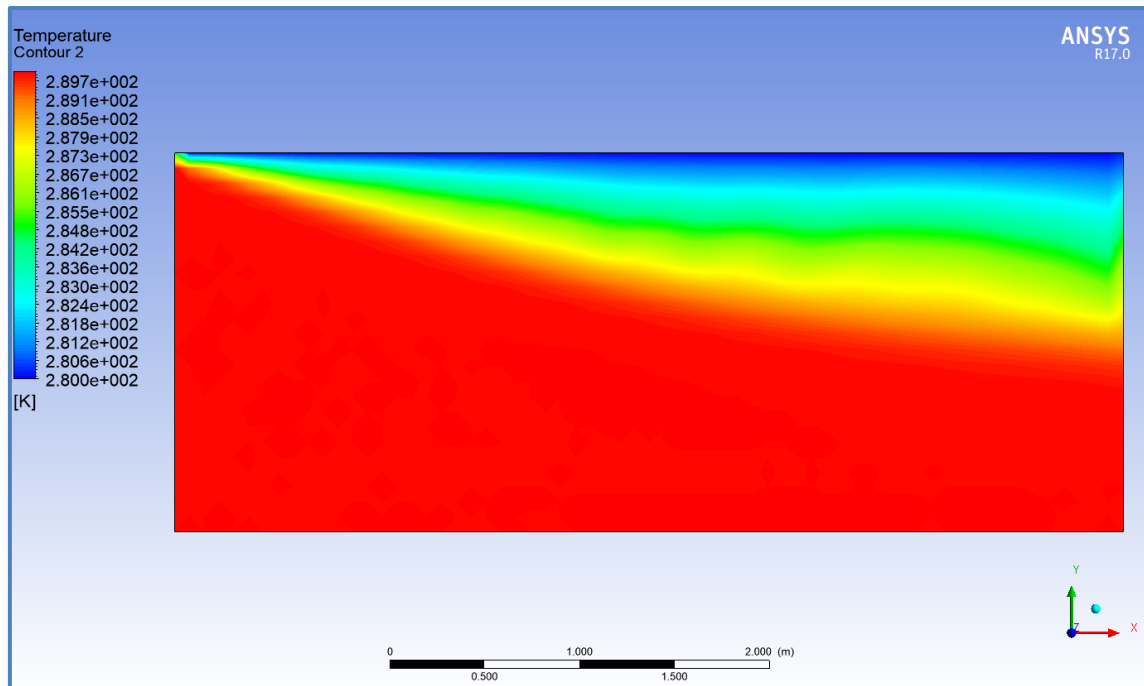


Figura 8.71. Perfil de Temperatura

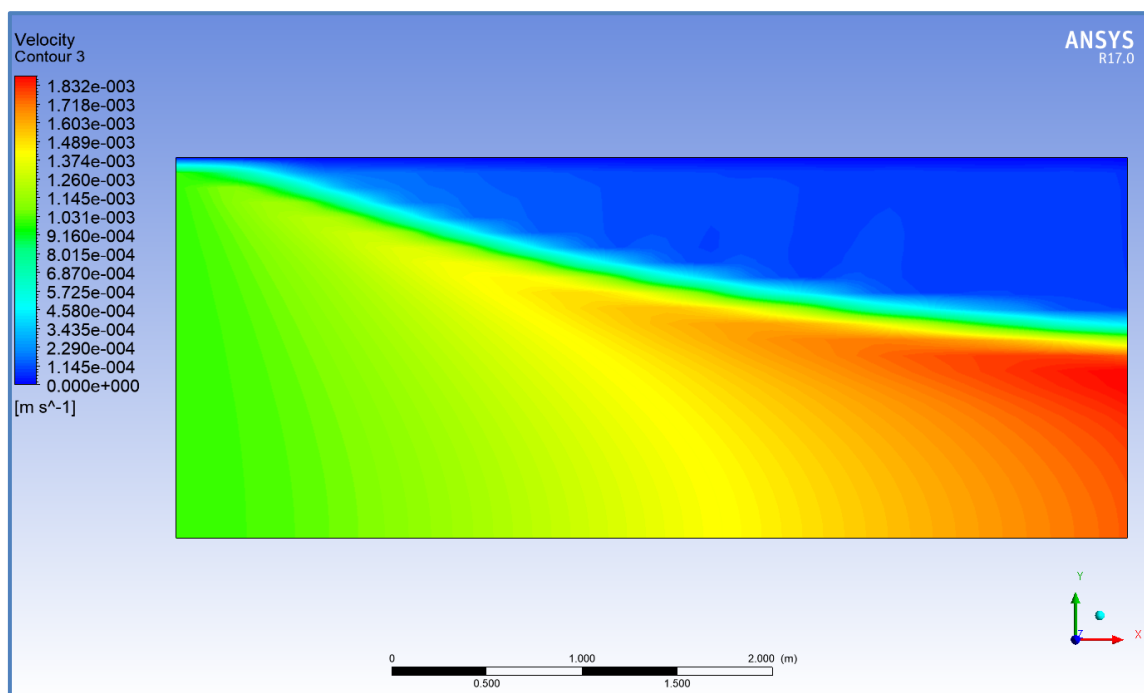


Figura 8.72. Perfil de velocitat

8.5. Generació del model Criòstat

8.5.1. Criòstat 3D

L'objectiu inicial de la simulació era recrear el procés d'adsorció sobre una geometria 3D que recrees el Criòstat per tal d'extreure el rati d'adsorció a la temperatura i pressió desitjada. La geometria sobre la que s'executaria el càlcul és la de la *Figura 8.73*. En la geometria es poden diferenciar tres parts: l'IB (*Figura 8.74.*), l'AC (*Figura 8.75.*) i els dos serpentins d'LN2 anomenats negatiu (*Figura 8.76.*).

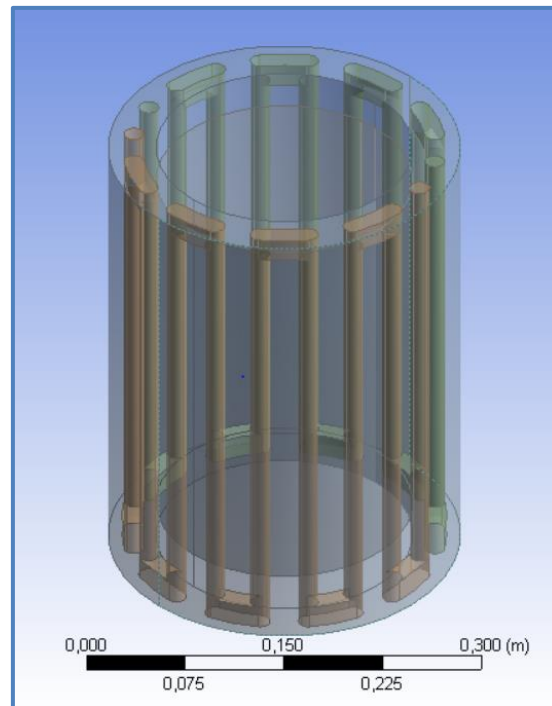


Figura 8.73. Geometria Criòstat

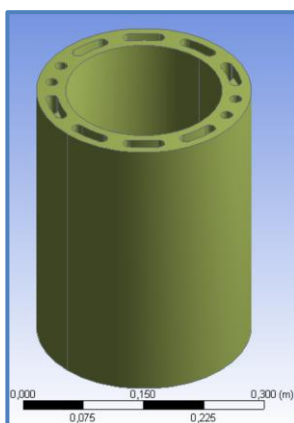


Figura 8.74. Internal Body

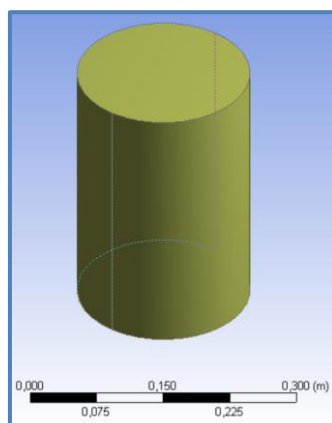


Figura 8.75. AC

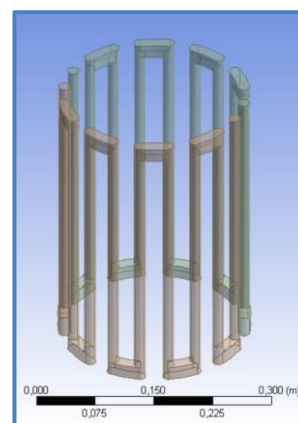


Figura 8.76. Negatiu

Amb la funció *Create Named Selection* es defineixen els *inlets* i *outlets* del LN2.

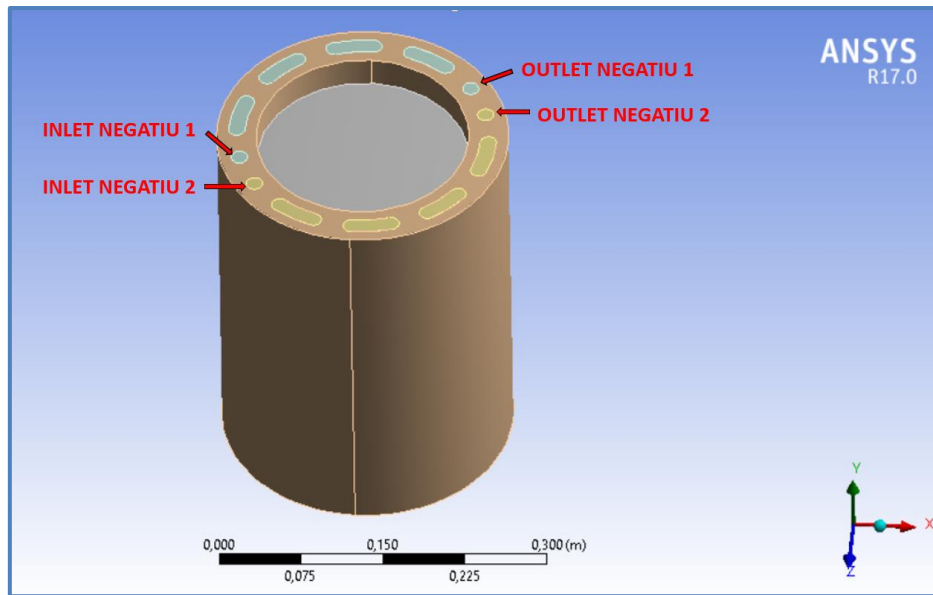


Figura 8.77. Geometria model Criòstat 3D

Tot i que al model real el vapor de LNG entra i surt per la zona superior, per tal de poder modelar un flux, al model d'Ansys se li dona un *inlet* a la part superior i un *outlet* a la part inferior del AC.

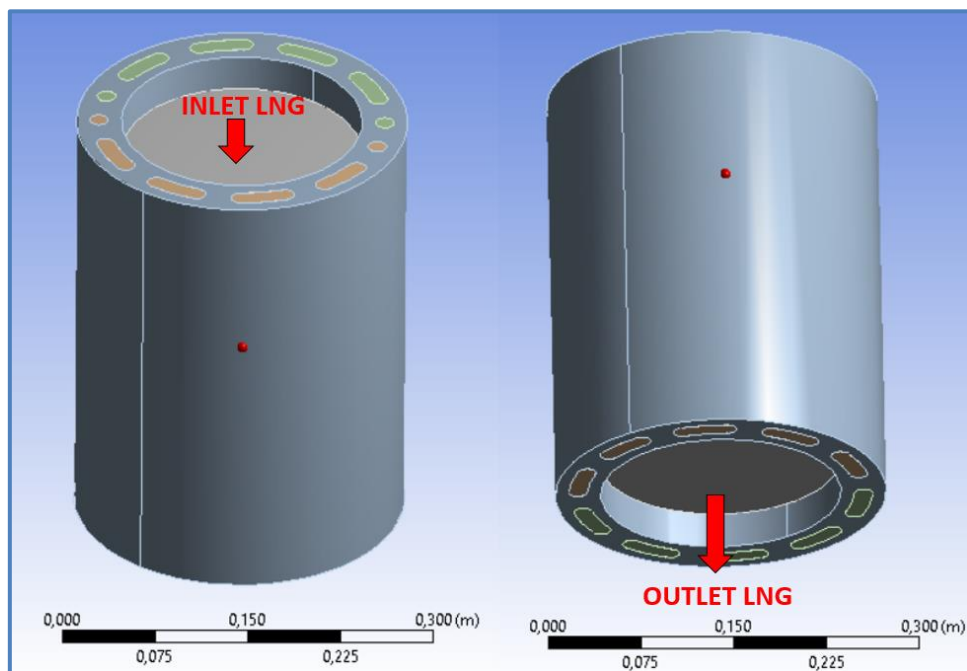


Figura 8.78. Geometria model Criòstat 3D (2)

Al *Meshing* es creen automàticament tres *connections* entre les superfícies de contacte. Com que són les *connections* correctes no es modifiquen i es treballa amb aquestes creades pel software.

Connections	Source	Target
Connection 1 (Figura 8.80)	Cara exterior AC	Cara interior IB
Connection 2 (Figura 8.81)	Superfície interna del IB corresponent al negatiu 1	Superfície del negatiu 1 que està en contacte amb el IB
Connection 3 (Figura 8.82)	Superfície interna del IB corresponent al negatiu 2	Superfície del negatiu 2 que està en contacte amb l'IB

Figura 8.79. Taula Connections model Criòstat 3D

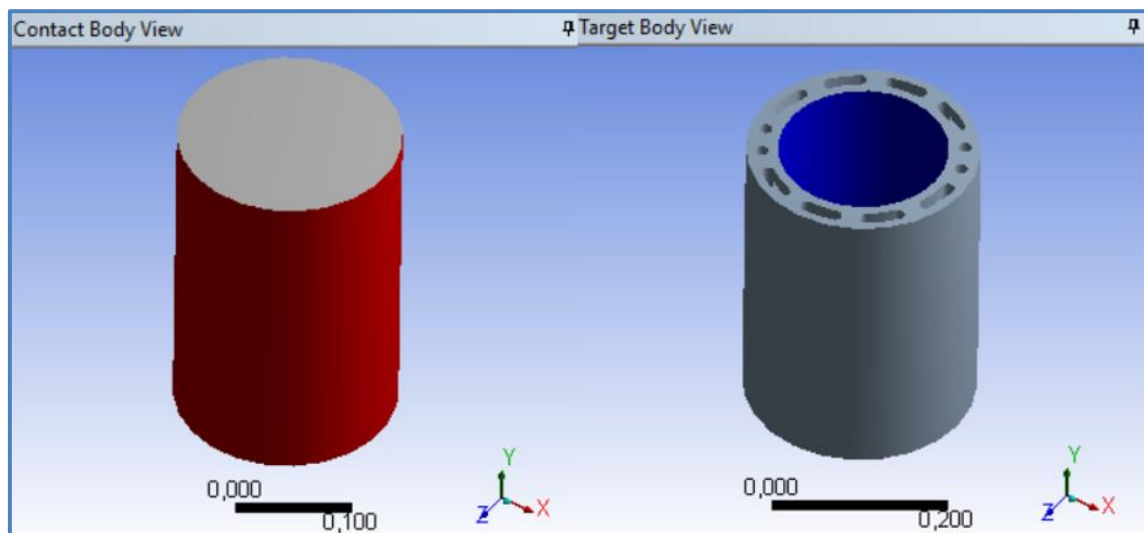


Figura 8.80. Connection 1

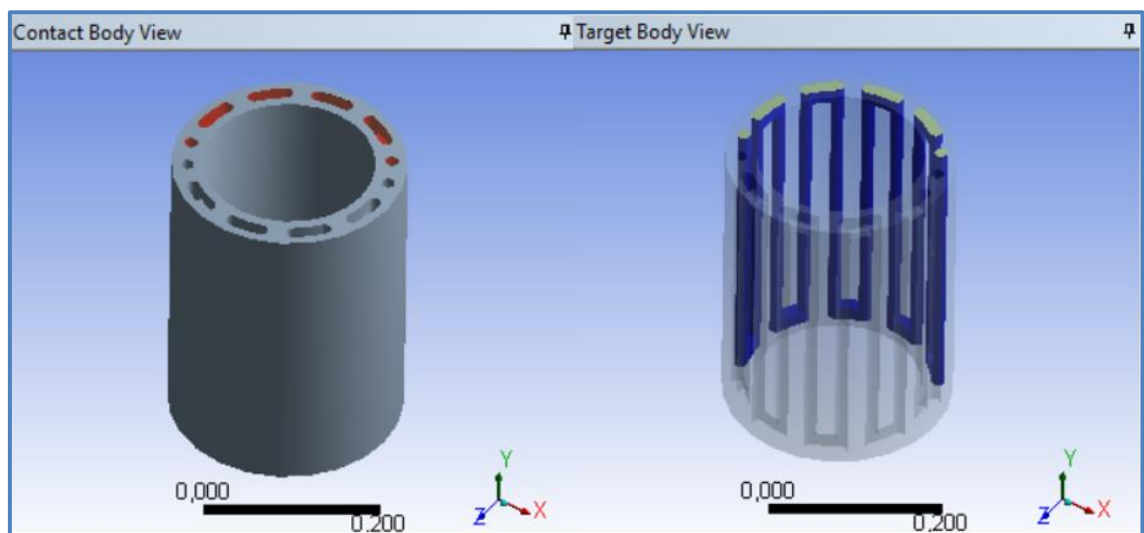


Figura 8.81. Connection 2

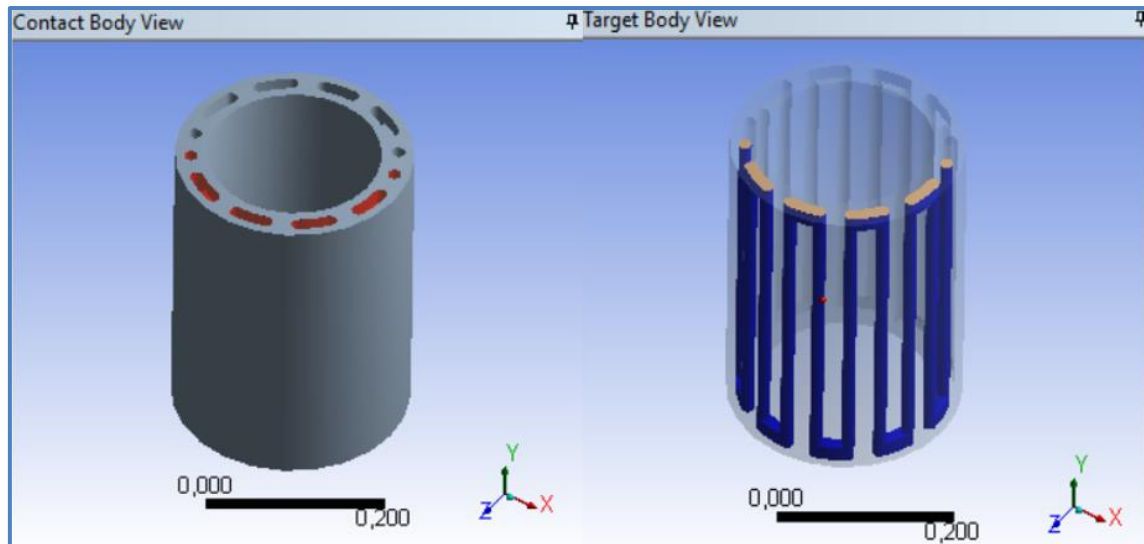


Figura 8.82. Connection 3

Un cop creada la *Mesh*, s'executa el *setup (Fluent)*, i a l'apartat de *Setting Up Physics*, per tal de permetre la transferència de calor s'activa l'equació d'energia. A l'apartat de *Models*, a *Viscous* es selecciona el tipus de *k-epsilon*. A l'opció de *Near-wall treatment* es selecciona l'opció d'*Enhanced wall treatment*, ja que proporciona solucions coherents per a tots els valors y^+ . Aquest tipus de tractament és aconsellable quan s'utilitza el model *k-epsilon* per problemes d'una sola fase en flux de fluids. Per contra, l'opció que apareix per defecte és la *Standard wall functions*, que generalment s'aplica si el primer centre de la cel·la adjacent a paret té una y^+ més gran que 30.

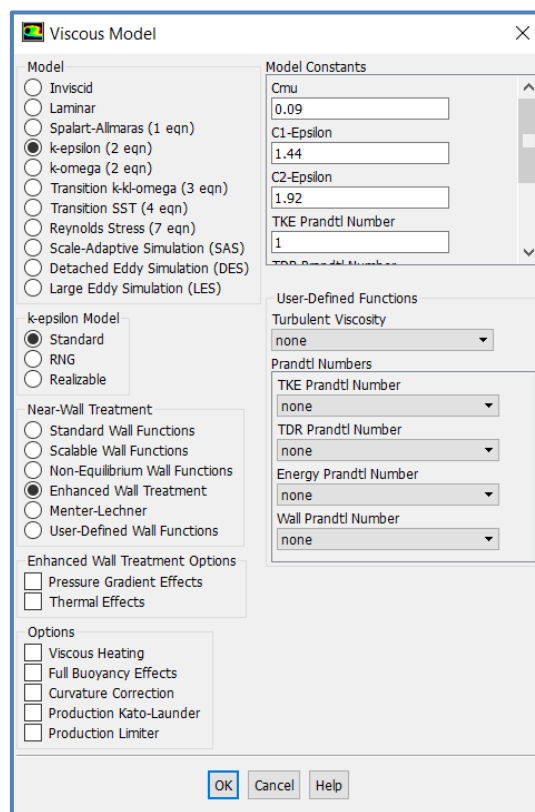


Figura 8.83. Viscous Model

Seguint el mateix procediment que a l'exemple 8.3.2. *Heat exchanger – Shell and Tube* s'eliminen les mesh interfaces creades automàticament i es tornen a crear unint *source* i *target*, i habilitant l'opció *Coupled*.

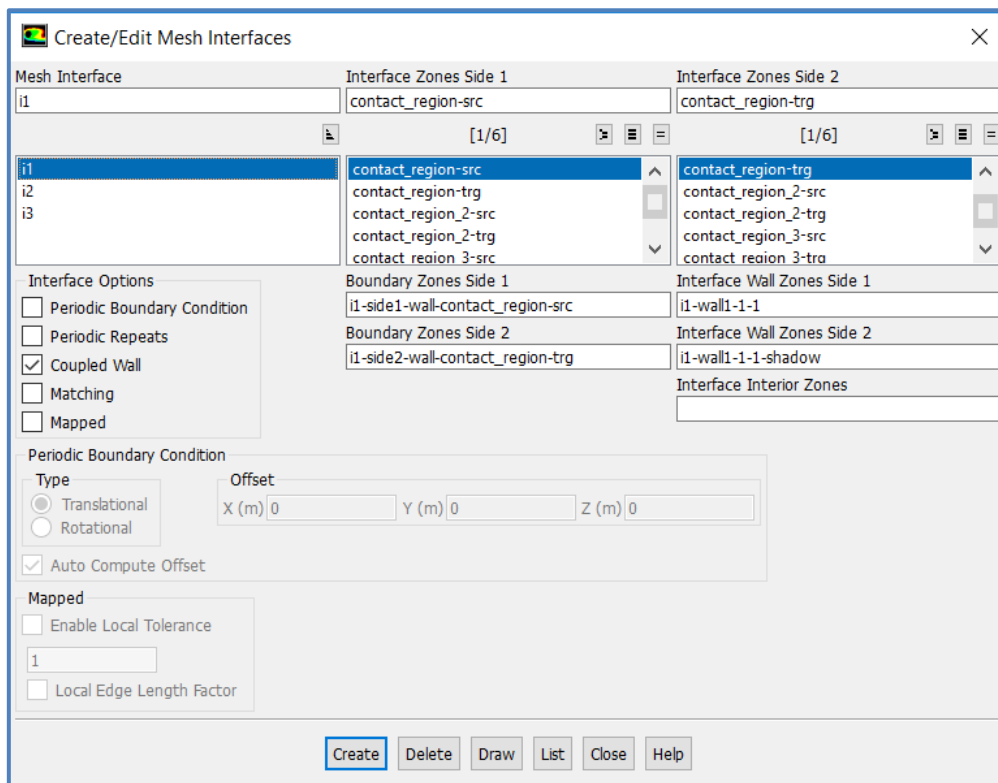


Figura 8.84. Create/Edit Mesh Interfaces

Abans d'incorporar cap UDF és important preveure si té algun requeriment previ. En aquest cas, ja que hi hauran 4 factors definits amb `DEFINE_ADJUST` (`ads`, `q_ads`, `d_ads`, `H_ads`), aquests 4 valors s'hauran d'emmagatzemar en 4 UDSs. És per això que és important crear els 4 UDS abans d'incorporar el codi, ja que sinó aquest buscarà on emmagatzemar aquests 4 valors i no trobarà cap UDS creat encara.

Un cop creats els 4 UDSs, a *User-Defined, Functions, Interpret* es selecciona el fitxer `UDF_SIMULACIO.c` que incorpora totes les UDF necessàries.

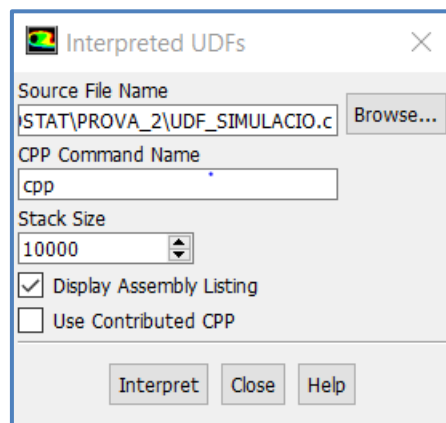


Figura 8.85. Interpreted UDFs

Per una banda, les UDF d'energia i massa se li associen al AC a *Cell Zone Conditions*, habilitant els *Source Terms*.

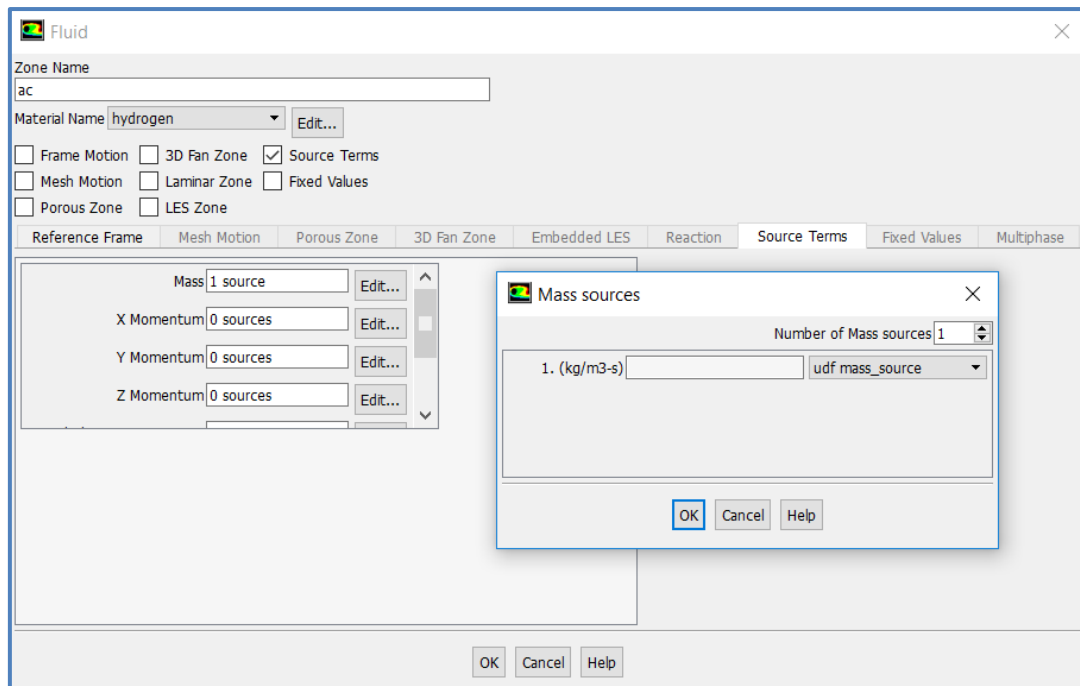


Figura 8.86. Mass source

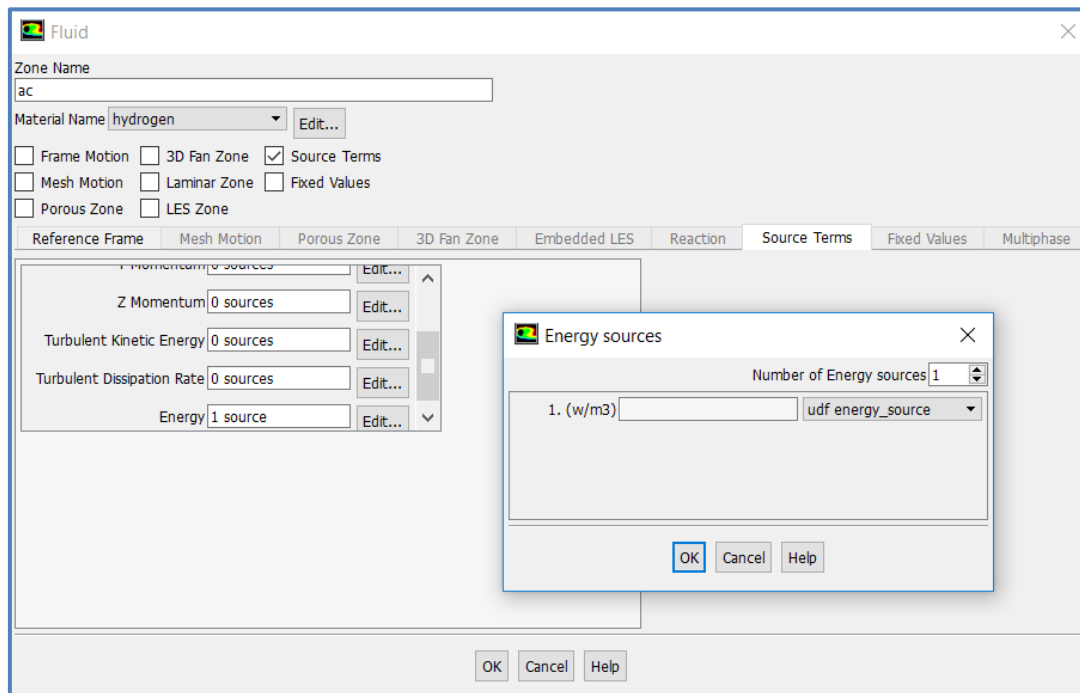


Figura 8.87 Energy source

D'altra banda a *User-Defined Functions Hooks*, aquelles UDFs definides amb l'ordre `DEFINE_ADJUST` s'han de seleccionar.

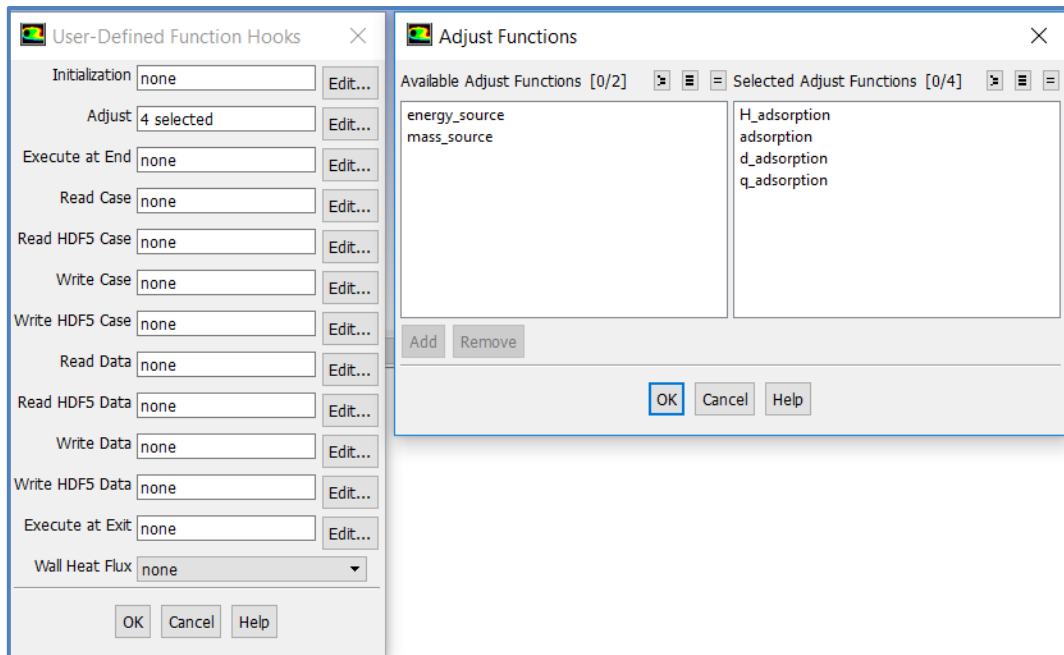


Figura 8.88. Adjust Functions

Tot i poder ser interpretat el codi UDF_ADSORCIO.c correctament i poder seleccionar cada UDF per separat, a l'hora d'executar el càlcul rebia l'error *"received a fatal signal (Segmentation fault)"*. Aquest error pot tenir multitud de fonts d'origen del problema, però en general, en la majoria de casos on es treballa amb UDFs prové d'algun error de càlcul. És per això que tornant a analitzar el *paper* d'origen d'aquest codi vaig observar que aquestes UDFs les aplicaven sobre un model 2D i que probablement per un model 3D no fos vàlid perquè a l'execució del codi es necessitaria definir un altre dimensió.

8.5.1.1. Simulació IB i LN2

Amb l'objectiu de comprovar que la part de la simulació que compren l'IB i el negatiu sigui correcte es simula un model amb aquests dos components.

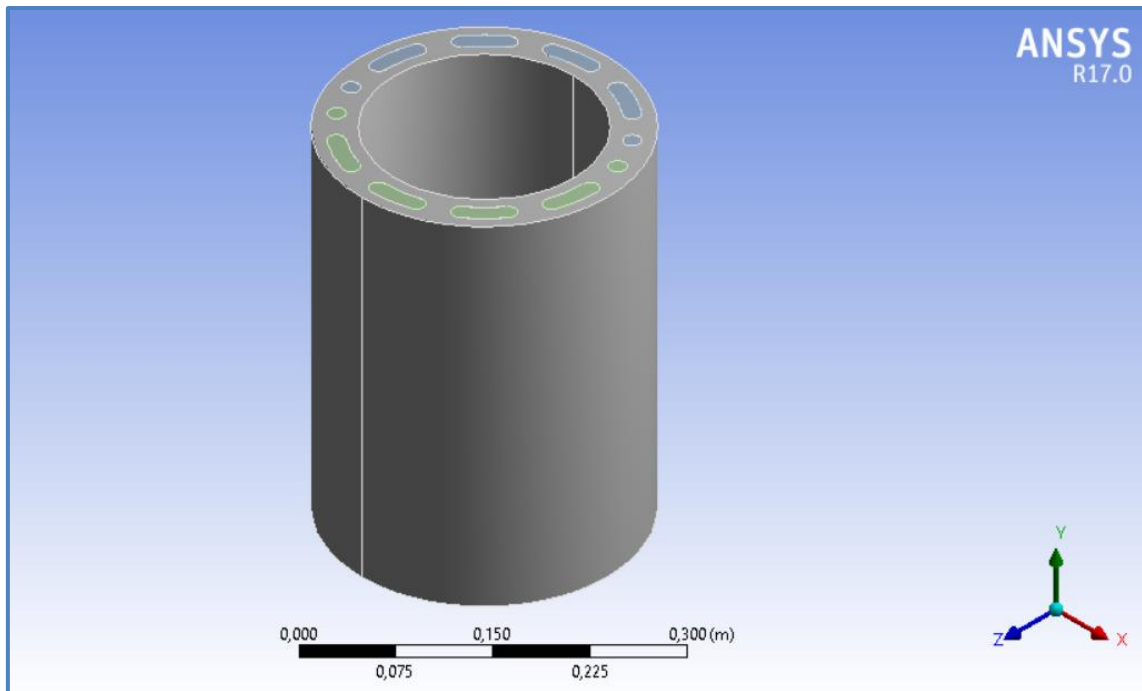


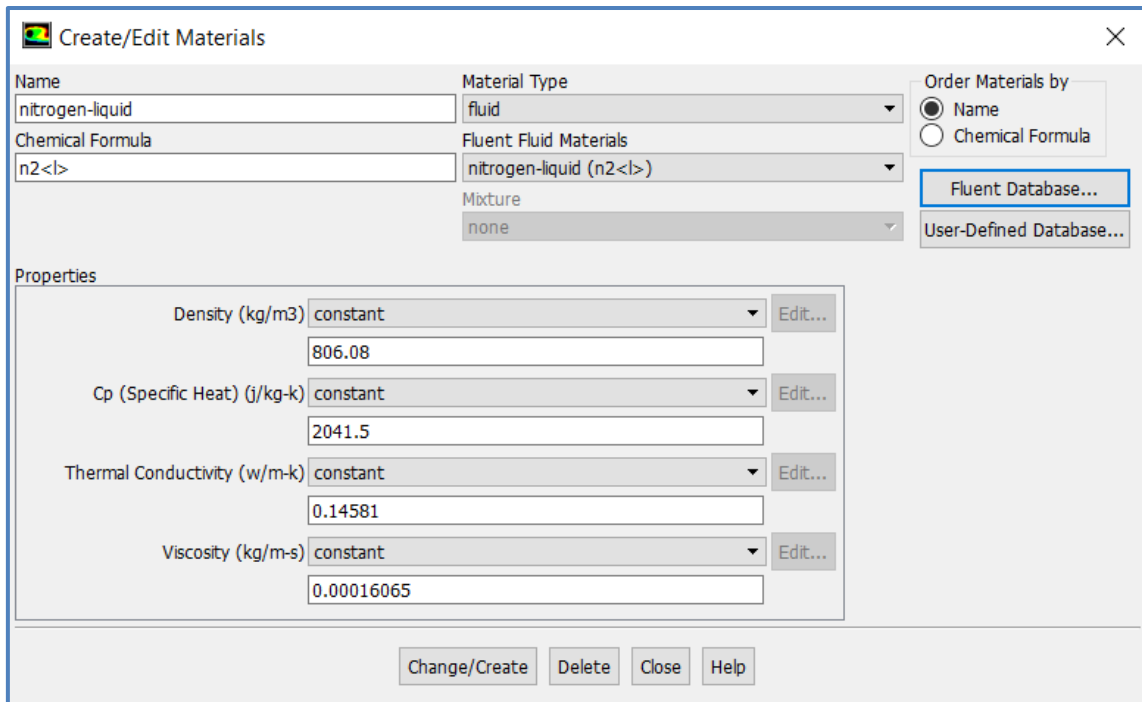
Figura 8.89. Geometria IB i negatiu

Igual que al model amb l'AC es creen automàticament les dos *connections* entre els diferents volums.

Connections	Source	Target
Connection 1 (Figura 8.81)	Superfície interna del IB corresponent al negatiu 1	Superfície del negatiu 1 que està en contacte amb el IB
Connection 2 (Figura 8.82)	Superfície interna del IB corresponent al negatiu 2	Superfície del negatiu 2 que està en contacte amb l'IB

Figura 8.90. Connections

Al *setup* es configura el *Model Viscous* com a l'apartat 8.5.1. *Criòstat 3D*. A materials, com a fluid es selecciona el nitrogen líquid de la *Fluent Data Base*, i com a sòlid es selecciona l'alumini i es modifiquen algunes propietats per adaptar-lo al Al-5083 que s'utilitzarà.



Create/Edit Materials

Name: nitrogen-liquid

Material Type: fluid

Chemical Formula: n2<l>

Fluent Fluid Materials: nitrogen-liquid (n2<l>)

Mixture: none

Order Materials by: ☒ Name ☐ Chemical Formula

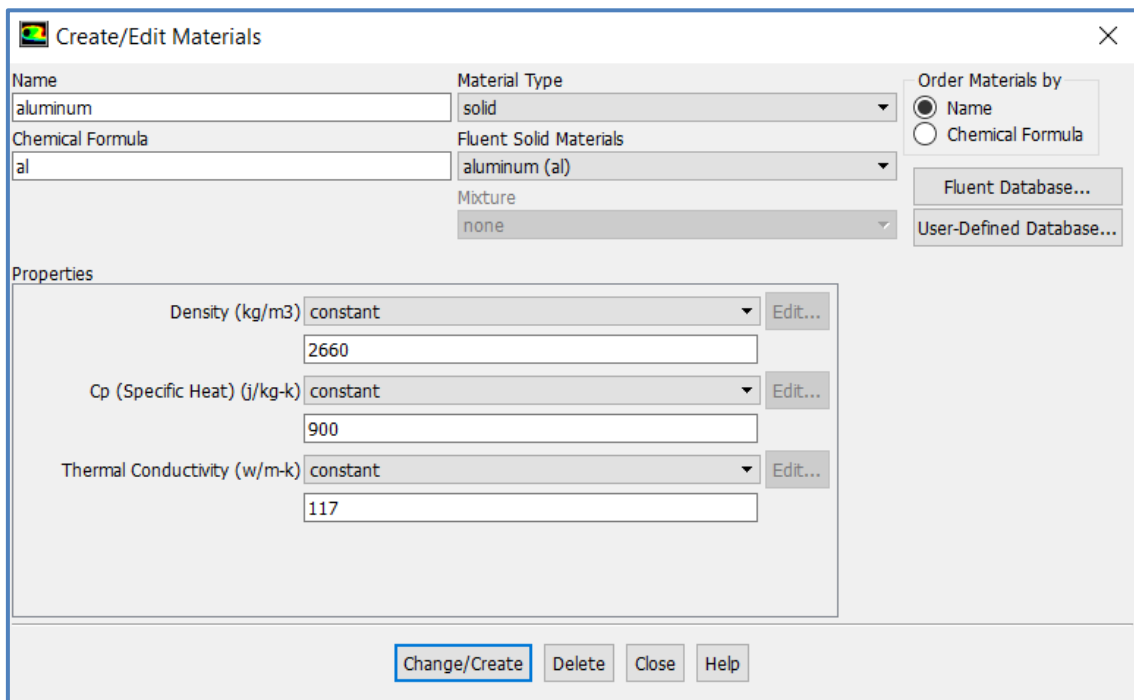
Fluent Database...
User-Defined Database...

Properties

Density (kg/m3)	constant	Edit...
	806.08	
Cp (Specific Heat) (j/kg-k)	constant	Edit...
	2041.5	
Thermal Conductivity (w/m-k)	constant	Edit...
	0.14581	
Viscosity (kg/m-s)	constant	Edit...
	0.00016065	

Change/Create Delete Close Help

Figura 8.91. Create/Edit Materials - Nitrogen liquid



Create/Edit Materials

Name: aluminum

Material Type: solid

Chemical Formula: al

Fluent Solid Materials: aluminum (al)

Mixture: none

Order Materials by: ☒ Name ☐ Chemical Formula

Fluent Database...
User-Defined Database...

Properties

Density (kg/m3)	constant	Edit...
	2660	
Cp (Specific Heat) (j/kg-k)	constant	Edit...
	900	
Thermal Conductivity (w/m-k)	constant	Edit...
	117	

Change/Create Delete Close Help

Figura 8.92. Create/Edit Materials - aluminum

A *Cell Zone Conditions* se li dona condició de sòlid d'alumini al IB i de fluid de nitrogen líquid al negatiu. A *Mesh Interfaces* s'eliminen les dues creades automàticament i es tornen a unir *source* i *target* habilitant l'opció de *Coupled Wall* per tal d'habilitar la transferència de calor.

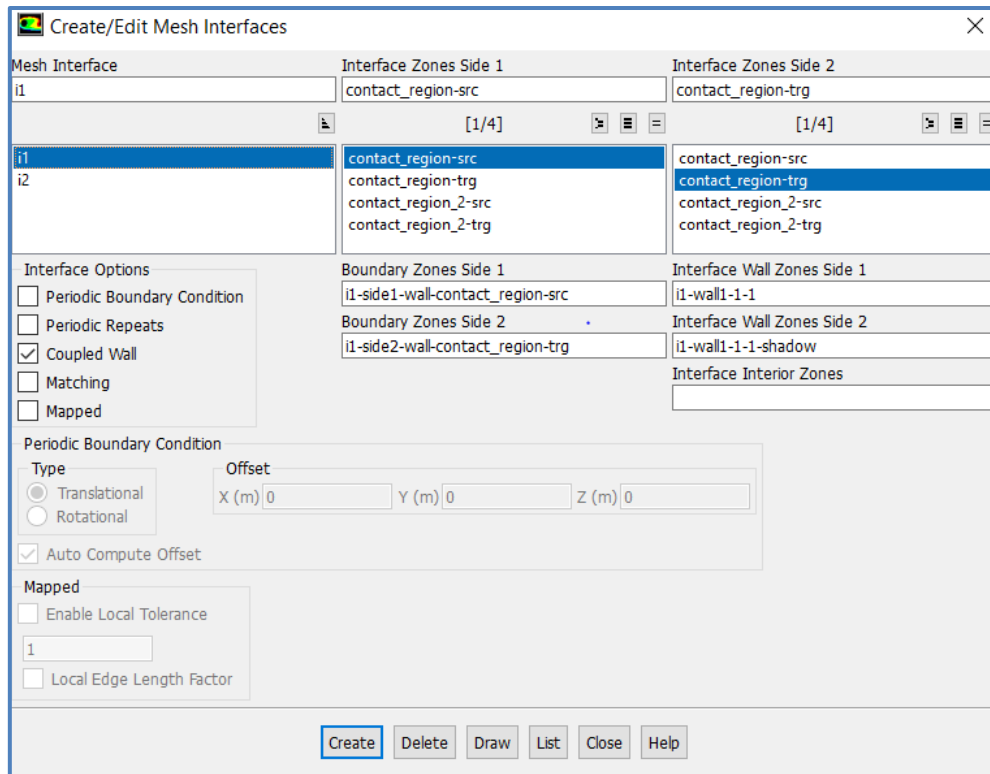


Figura 8.93. Create/Edit Mesh Interfaces

A *Boundary Conditions* es defineixen les propietats dels dos *inlets* com es mostra a la Figura 8.94 i 8.95. Als dos *outlets* només es defineix el diàmetre hidràulic i es deixen per defecte les altres propietats, ja que seran les que es veuran modificades.

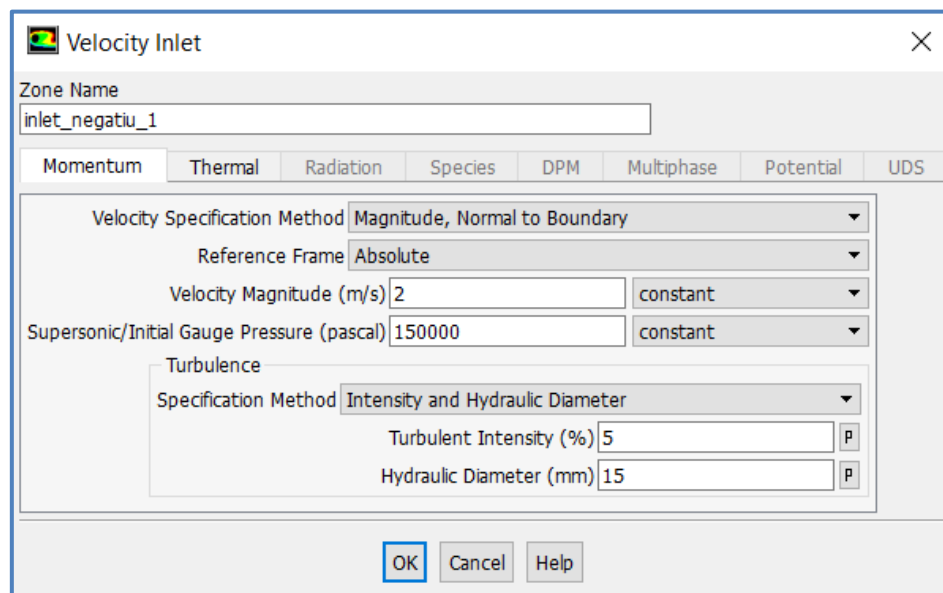
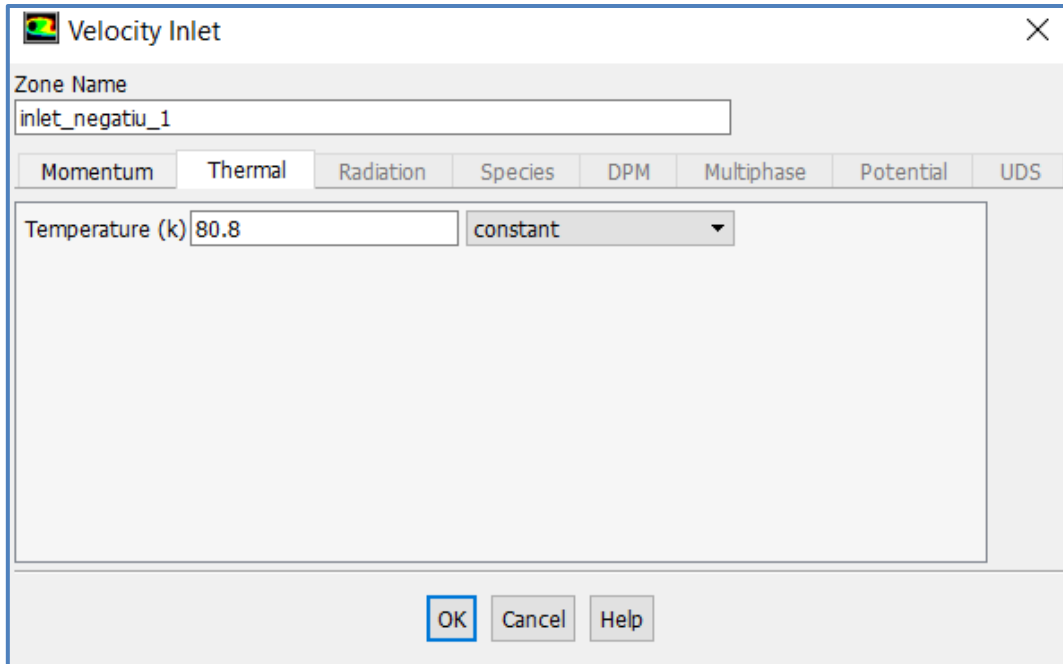


Figura 8.94. Inlet (1)

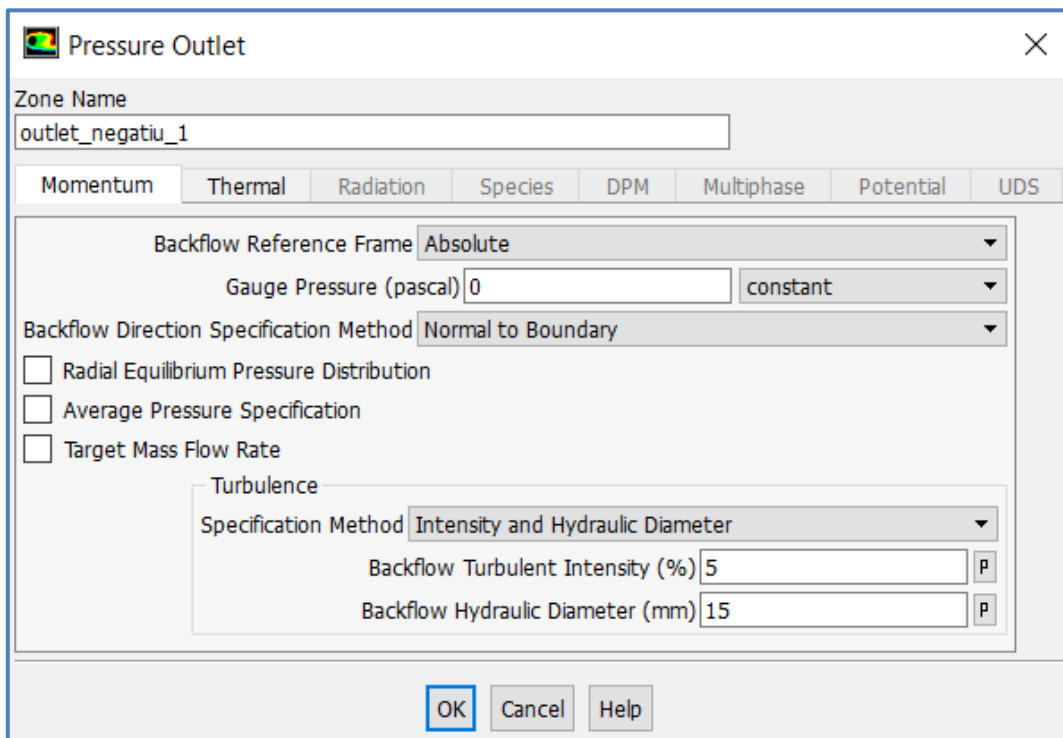


Velocity Inlet

Zone Name

Temperature (k)

Figura 8.95. Inlet (2)



Pressure Outlet

Zone Name

Backflow Reference Frame

Gauge Pressure (pascal)

Backflow Direction Specification Method

☐ Radial Equilibrium Pressure Distribution
☐ Average Pressure Specification
☐ Target Mass Flow Rate

Turbulence

Specification Method

Backflow Turbulent Intensity (%)

Backflow Hydraulic Diameter (mm)

Figura 8.96. Outlet

Les *Operating conditions* es mostren a la Figura 8.97.

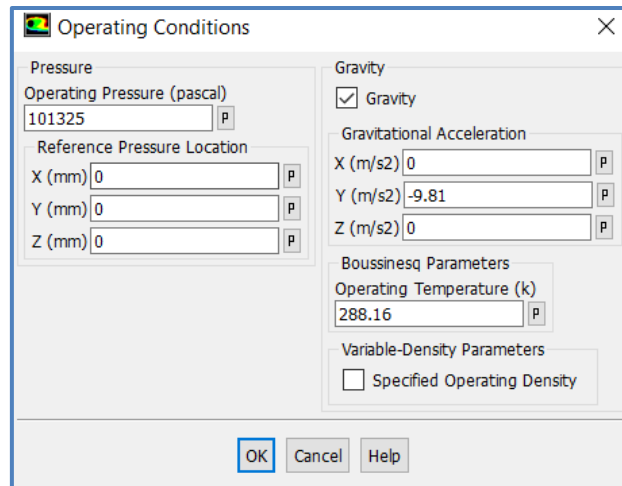


Figura 8.97. Operating Conditions

Un cop acabat el càlcul es poden visualitzar els resultats al *CFD-Post*.

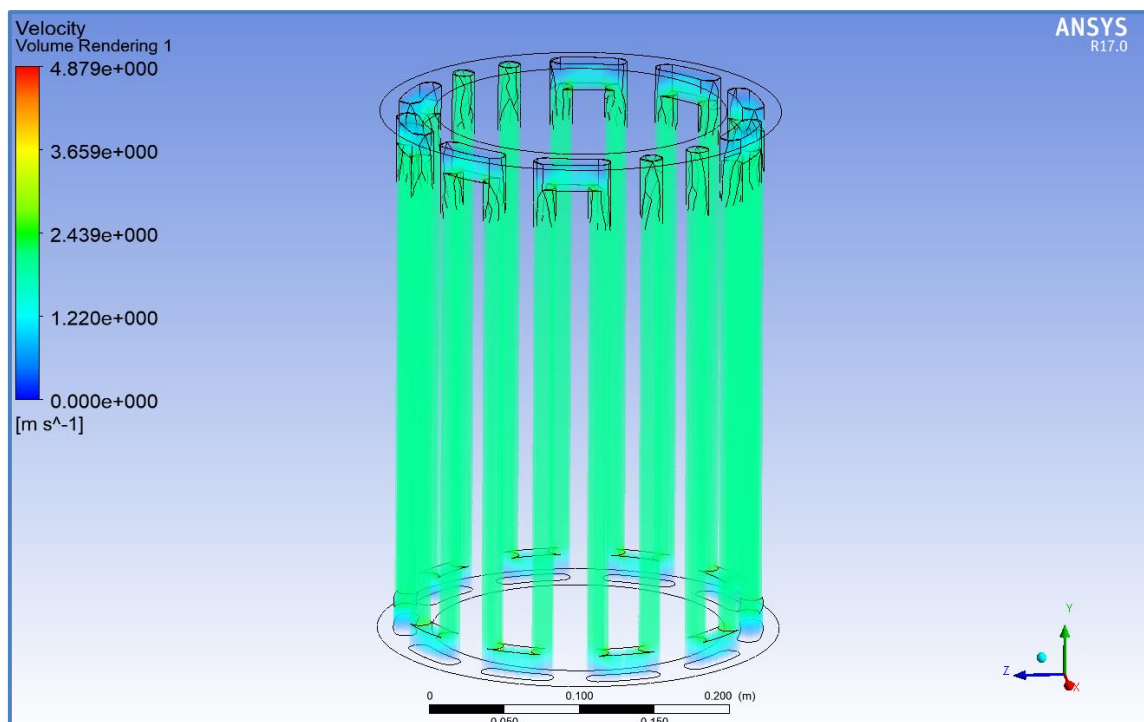


Figura 8.98. Velocity Volume Rendering

8.5.2. Criòstat 2D

Per tal de comprovar si l'error del codi era la seva aplicació sobre un model tridimensional i no bidimensional es va crear un model 2D del Criòstat. La idea d'aquest model bidimensional va ser extret del exemple 8.3.6. *Ethanol adsorption* i es mostra a la Figura 8.89.

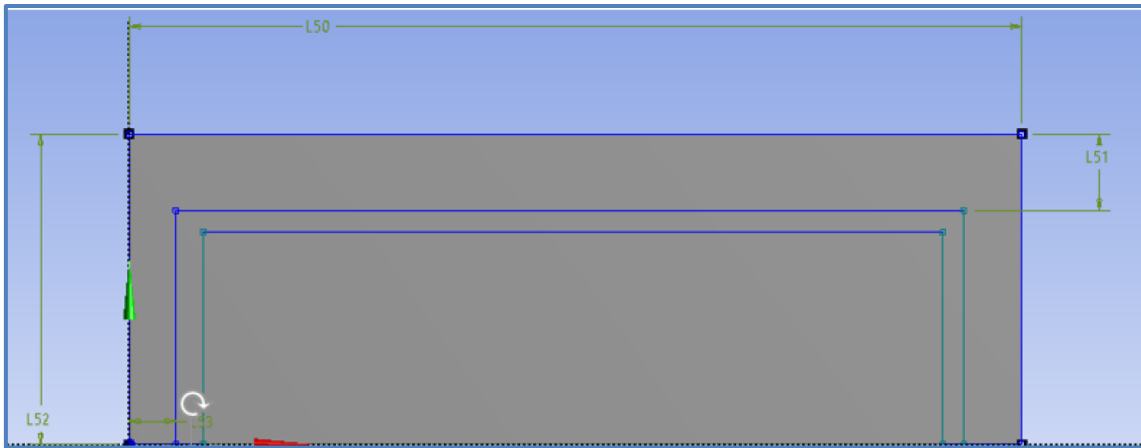


Figura 8.89. Geometria Criostat model 2D

Està compost per tres geometries en forma d'U invertida. La més externa representaria l'alumini del IB, la del mig el metà i la més interna l'AC.

En general, les condicions de contorn del setup, són pràcticament iguals que les del model 3D. No obstant, una de les condicions que si canvien són les *Mesh Interfaces*, que es creen de noves entre les línies de contacte entre el IB-metà i metà-AC.

Fent una comparació entre la configuració de l'exemple 8.3.6. *Ethanol adsorption* i aquest model sorgeixen dubtes. Un d'ells és que a l'exemple la zona porosa es concep com a un material sòlid, i se li dóna les propietats del AC en qüestió. En canvi, com s'ha vist als dos exemples de *Porous Media* es possible declarar aquesta com a fluid, fluid que serà adsorbit, i gràcies a l'opció *Porous Zone*, proporcionar-li les resistències que suposaria l'AC. Un altre paràmetre a discutir és el tipus de model. En la majoria de casos estudiats s'utilitza el tipus *Viscous (k-epsilon)* però per tal de simplificar-ho i facilitar el càlcul també es podria reduir a un model *Viscous (Laminar)*

Ja sigui introduint uns paràmetres o altres, s'interpreten de la mateixa forma les UDFs i es rep de nou l'error de "*received a fatal signal (Segmentation fault)*".

8.6. Modes d'error

Analitzant els errors que donen els models en 2D i 3D del Criostat, i amb l'experiència d'exemples previs es recopila un llistat de possibles errors pels quals no simula correctament:

- Primer de tot, el codi que proporciona el *paper* no declara les variables. És a dir, per exemple a la UDF_ADSORPTION "ads" no estava declarada.

```
#include "udf.h"

DEFINE_ADJUST(adsorption, domain)
{
    Thread *t; cell_t c; int ads; real E, A, P;
    thread_loop_c(t, domain)
    {
        begin_c_loop(c, t)
        {
            real tem = C_T(c, t);
            P = C_P(c, t) + RP_Get_Real("operating-pressure");
            E = 3080 + 18.9 * tem;
            A = 8.31429 * tem * log(1.47E9 / P);
            C_UDSI(c, t, ads) = 71.6 * exp(-A * A / (E * E));
        }
        end_c_loop(c, t)
    }
}
```

En aquell moment va sorgir el dubte de com s'havia de declarar, però buscant a manuals d'Ansys es va veure que el tipus de funció C_UDSI que s'utilitzava havia d'estar definida d'una forma concreta, amb un "int". És per això que se li va donar aquesta definició de variable.

Macro	Argument Types	Returns
C_UDSI(c,t,i)	cell_t c, Thread *t, int i	UDS cell variables

- Un altre origen del error podria ser la inicialització de les variables. Tot i declarar les variables com un "int" aquestes no són inicialitzades, és a dir, no tenen un valor inicial, i per tant quan el codi vulgui fer el primer "loop" o el primer càlcul no es trobarà cap valor. El fet que el paper no inicialitzi aquestes variables també dona que pensar com s'hauria de fer, si se li dona un valor inicial, o potser ho agafa d'alguna base de dades.
- Un error que s'ha mencionat al model 2D i 3D del Criòstat és que el codi havia sigut creat per a una geometria bidimensional, i que per tant si el volgués aplicar sobre una geometria 3D probablement es necessitaria declarar una altre dimensió o tipus de cel·la. És a dir, utilitzant un altre cop l'exemple de la UDF_ADSORPTION, el càlcul s'executa en forma de *loops* o cicles dins d'un domini passant per cada *cell* "c" en un temps "t". Per a un model tridimensional hi hauria d'haver un altre format de cel·la o una altre dimensió declarada.

```
#include "udf.h"

DEFINE_ADJUST(adsorption, domain)
{
    Thread* t; cell_t c; int ads; real E,A,P;
    thread_loop_c(t, domain)
    {
        begin_c_loop(c, t)
        {
            real tem=C_T(c, t);
            P=C_P(c, t)+RP_Get_Real("operating-pressure");
            E=3080+18.9*tem;
            A=8.31429*tem*log(1.47E9/P);
            C_UDSI(c, t, ads)=71.6*exp(-A*A/(E*E));
        }
        end_c_loop(c, t)
    }
}
```

- L'error també podria vindre per la forma en la que es declaren els UDS. Com s'explica a l'apartat 8.2.3. *UDS* cada UDS té quatre termes (*unsteady*, *convection*, *diffusion* i *source*) que es poden definir amb ordres MACRO especials per a cada tipus. No obstant, s'ha comprovat que amb l'ordre DEFINE_ADJUST també es poden declarar, però no se sap si té la mateixa eficàcia a l'hora d'executar el càlcul. Deixant de banda amb quin tipus de MACRO es defineixin també és important saber quin dels quatre termes es deixa predeterminat, quin s'anul·la o quin es modifica amb les UDF. Per exemple, a la tesis "Development of Adsorber Beds for Air Conditioning in Vehicle Applications" per tal de recrear l'adsorció anul·la els termes de convecció i difusió, i només manté el *unsteady* i la *source*. Ara bé, no aclara quin dels termes modifica ni com.
- L'exemple 8.3.6. *Ethanol adsorption* simula la zona porosa associant-li un material porós, sòlid, amb les propietats pròpies del AC en qüestió. En canvi, com s'ha vist a l'exemple 8.3.3. *Porous Media* i 8.3.4. *Porous Media 2*, la zona porosa es defineix amb el fluid que adsorbirà i se li dóna unes resistències a la *Cell Zone Conditions*, *Porous Zone*. Per tant, en un cas es proporciona el material porós amb les seves propietats directament i en l'altre el fluid adsorbit amb les resistències que suposa el material porós. Aquesta divergència en com configurar el *setup* també pot ser una font d'error.

CAPÍTOL 9: Pressupost

S'han consultat diverses empreses per tal de dur a terme un pressupost aproximat del cost que tindria fabricar el Criòstat, tant en quant a materials com a hores invertides.

S'ha consultat a *Talleres Jesman S.C.P.* pel mecanitzat d'alumini del *Internal Body*, la tapa inferior i la tapa superior. A *Samson* els manòmetres, les vàlvules automàtiques i les manuals. A *Omega* els transductors criogènics de pressió. A *Cryotherm* totes les canonades i aquells components necessaris per poder unir-les des de les fonts de N2 i LNG fins al Criòstat, i la sortida d'aquest. A *Ingevity* els monòlits d'AC. I finalment, a *Worthington* les ampolles Dewar d'LN2. També s'han tingut en comte les hores invertides com a enginyer a l'apartat "ENGINYERIA".

Empresa	Component	Unitats	€/unitat	Preu [€]
JESMAN	Mecanitzat d'alumini (IB+Tapa Inferior+Tapa Superior)	1	4000	4000
				4000
SAMSON	Vàlvula globus amb aleta d'aïllament 3241-7	4	5000	20000
	Vàlvula de bola trunnion criogènica amb aleta d'aïllament TOT/RES DN15	4	1000	4000
	Manòmetre <i>Media 05</i>	4	3000	12000
				36000
OMEGA	Transductor PX1005	4	1500	6000
				6000
CRYOTHERM	<i>Transferline DN14, rigid</i>	12	53,41	640,92
	<i>Vaccum element DN14, rigid</i>	4	734	2936
	<i>End piece DN14 R 1/2" male thread</i>	8	156,5	1252
	<i>Sleeve reduced 1/2</i>	1	26,24	26,24
	<i>Superinsulated transferline, operating manual</i>	1	29,13	29,13
	<i>Projectengineering on hourly basis</i>	2	130	260
	<i>Packing and shipping costs</i>	1	500	500
				5644,29
INGEVITY	Monòlits	5	120	600
				600
WORTHINGTON	<i>Dewar LN2</i>	1	850	850
				850
ENGINYERIA		580	15	8700
				8700

Total	61.794,29
--------------	------------------

Durant tota la recerca dels diferents components s'ha tingut molt en compte les condicions de temperatura i pressió a les quals es treballarà. Això ha fet que la recerca hagi sigut encara més exhaustiva ja que no qualsevol component del mercat és vàlid per tractar materials criogènics.

CAPÍTOL 10: Conclusions

Per tal de poder recrear el procés d'adsorció, prèviament, tal i com es mostra en aquest document, s'ha fet un treball de recerca sobre tots els factors involucrats en el procés. Aquests factors engloben propietats de materials utilitzats com l'AC, tipus de sistemes de gas natural, teories que descriuen el procés d'adsorció i les seves particularitats. I no només hi ha hagut una recerca teòrica, sinó que també se n'ha fet una de pràctica realitzant múltiples exemples d'*Ansys Fluent* per tal d'adquirir els coneixements necessaris per dur a terme la simulació.

L'objectiu inicial del treball, extreure les isoterms d'adsorció a la temperatura de treball del sistema, no s'ha assolit. S'ha creat un model, tant bidimensional com tridimensional, del Criòstat per poder simular-ho. S'han configurat correctament les condicions de contorn d'ambdós sistemes, però errors relacionats amb les UDFs no han permès el càlcul. El fet d'iniciar aquest treball amb coneixements nuls d'*Ansys Fluent* i de llenguatge de programació C ha condicionat completament el desenvolupament d'aquest i ha provocat que hi hagués un gran treball d'autoaprenentatge, tant del software com del llenguatge. No obstant, tenint en compte la complexitat del procés d'adsorció, s'ha fet un gran avanç en l'estudi d'aquest sistema i s'han identificat possibles errors que podrien desencadenar en noves línies de treball.

A nivell personal ha sigut un repte difícil. A l'inici del treball vaig dedicar moltes hores a documentar-me i no acabava de visualitzar quin era l'objectiu final. Gràcies a alguns *papers* on es caracteritzaven models semblants vaig tenir clar cap a on havia de conduir la investigació. És llavors quan vaig veure la necessitat d'aprofundir més en el *Fluent* i en les UDFs. Ha sigut un treball complex però també una oportunitat a créixer tant en l'àmbit acadèmic com personal.

CAPÍTOL 11: Bibliografia i recursos

- [1] «ANSYS Fluent Customization Manual.» 2015.
- [2] «ANSYS Fluent Tutorial Guide.» 2015.
- [3] Builes, Santiago, Stanley I. Sandler, i Ruichang Xiong. «Isosteric heats of gas and liquid adsorption.» *Langmuir* 29, nº 33 (8 2013): 10416-10422.
- [4] Chen, Q. S., J. Wegrzyn, y V. Prasad. «Analysis of temperature and pressure changes in liquefied natural gas (LNG) cryogenic tanks.» *Cryogenics* 44, nº 10 (10 2004): 701-709.
- [5] Do, Duong D. «Adsorption Analysis: Equilibria and Kinetics.» Vol. 2. Imperial College Press, 1998.
- [6] Esteves, Isabel A.A.C., Marta S.S. Lopes, Pedro M.C. Nunes, y José P.B. Mota. «Adsorption of natural gas and biogas components on activated carbon.» *Separation and Purification Technology* 62, nº 2 (9 2008): 281-296.
- [7] Brunauer, Stephen, Emmet, P.H., i Teller, Edward. «Adsorption of gases in multimolecular layers.» s.f.
- [8] Himeno, Shuji, Toshiya Komatsu, i Shoichi Fujita. «High-pressure adsorption equilibria of methane and carbon dioxide on several activated carbons.» *Journal of Chemical and Engineering Data* 50, nº 2 (3 2005): 369-376.
- [9] Jribi, Skander, Takahiko Miyazaki, Bidyut Baran Saha, Shigeru Koyama, Shinnosuke Maeda, i Tomohiro Maruyama. «CFD simulation and experimental validation of ethanol adsorption onto activated carbon packed heat exchanger» *International Journal of Refrigeration* (Elsevier Ltd) 74 (2 2017): 343-351.
- [10] Loh, Wai Soong, i altres. «Improved isotherm data for adsorption of methane on activated carbons.» *Journal of Chemical and Engineering Data* 55, nº 8 (8 2010): 2840-2847.
- [11] Mahdi, Seyyed, i Nemati Mehr. «Development of Adsorber Beds for Air Conditioning in Vehicle Applications.» 2016.
- [12] Martins, D, I Catarino, D Lopes, I Esteves, J P Mota, i G Bonfait. «Low Temperature Adsorption Versus Pore Size in Activated Carbons.» s.f.
- [13] Padullés Domínguez, Roger. «Caracterització i simulació CFD-1D del procés d'evaporació en dipòsits de transport Heavy-duty» *Memòria i Annexos.* s.f.
- [14] Patil, Kedar Haradas, i Satyabrata Sahoo. «Charge characteristics of adsorbed natural gas storage system based on MAXSORB III.» *Journal of Natural Gas Science and Engineering* (Elsevier B.V.) 52 (4 2018): 267-282.
- [15] Ramgopal, M, i Satyabrata Sahoo. «A new tank configuration for large scale storage of natural gas in adsorbed form.» *International Journal Of Petrochemical Science & Engineering* (MedCrave Group, LLC) 2, nº 7 (8 2018).

- [16] Sanyal, A., S. Basu, i P. Kumar. «*Adsorption study of silica gel particle for improvement in design of adsorption beds used in solar driven cooling units.*» *Energy Procedia*. Elsevier Ltd, 2013. 656-665.
- [17] Sircar, S., i J. R. Hufton. «*Why does the linear driving force model for adsorption kinetics work?*» *Adsorption* (Kluwer Academic Publishers) 6, nº 2 (6 2000): 137-147.
- [18] UPC. «*Presentació Boil Off Gas Recovery System.*» s.f.
- [19] V. C. Menon i S. Komarneni. «*Porous Adsorbents for Vehicular Natural Gas Storage A review.*» 1998.
- [20] Ye, Feng, Jinsheng Xiao, Binxiang Hu, Pierre Benard, i Richard Chahine. «*Implementation for Model of Adsoptive Hydrogen Storage Using UDF in Fluent.*» *Physics Procedia* (Elsevier BV) 24 (3 2012): 793-800.

Webs com a ajuda de la simulació:

www.studentcommunity.ansys.com

www.cfd-online.com

www.researchgate.net

Proveïdors:

SAMSON - www.samsoncontrols.com

CRYOTHERM - www.cryotherm.de

OMEGA - www.omega.com

WORTHINGTON - www.worthingtonindustries.com

INGEVITY - www.ingevity.com

JESMAN

CAPÍTOL 12: ANNEXOS

12.1. Pressupost JESMAN



ELECTROEROSION

C/ Guifré, 639, 1ª Planta

08918 BADALONA (Barcelona)

Tel. 93 383 87 41 – Fax 93 383 97 34

E-mail: jjodra.jesmanscp@gmail.com

C.I.F. J-61771010

EMPRESA MERIT

ATT. Sr/Sra : Òscar Vicens Artés

Nº Oferta.MER 1902-001X

Buenos días les envío precio por la construcción del material detallado a continuación

- RECIPIENTE CILINDRICO EN ALUMINIO FORMADO POR 3
- PIEZAS (INTERNAL BODY)(TAPA SUPERIOR Y INFERIOR)
- Precio 4.000.-
- Plazo de entrega según sus necesidades

Javier Jodra Llorens
Gerente.
Badalona, 21 de Febrero de 2.019.



12.2. Pressupost CRYOTHERM



CRYOTHERM GmbH & Co. KG, D-57555 Euteneuen
 Universitat Polytècnica de Catalunya (EEBE)
 Mr. Oscar Vicens Artés
 Av. Eduard Maristany, 16
 E 08930 Sant Adria de Besos (Barcelona)
 SPANIEN

Quotation 11141294

Date	: 15.04.2019	Contact:	: Jan Schauder
Your Request	: Budget Offer	Phone:	: 0033 613 74 56 21
Quotation validity	: 15.07.2019	E-Mail adress	: jan.schauder@cryotherm-france.fr
Your VAT no.	:	Your supplier no.	:
Your customer no	: 103831		

Dear Mr. Artés,

thank you for your email-inquiry to Mr. Schauder dated 10.04.2019 and your interest in our cryogenic products.

According to your specification we offer as follows:

Pos.	Item	Quantity QU	Unit price	Total price
------	------	-------------	------------	-------------

Vakuumsuperisolierte Transferleitung DN14 zum verlustarmen Transport tiefkalt verflüssigter Gase.

Sie besteht aus Leitungselementen, die durch vakuumsuperisolierte Steckkupplungen oder Schweißkupplungen verbunden werden. Jeder Vakuumraum eines Leitungselementes wird durch ein kombiniertes Vakuumverschluß- und Sicherheitsventil abgesichert. Dehnungskompensatoren dienen dem Ausgleich von thermischen Längenänderungen.

Technische Daten:

Isolation: Mehrschichten-Vakuum-Isolation
 Innenleitung: DN 14, ES, Werkstoff 1.4301/1.4541
 Außenleitung: 52 mm, ES, Werkstoff 1.4301/1.4541
 Oberfläche: geschliffene Oberfläche
 Heliumlecktest: Integral, < 10⁻⁸ mbar l/s
 Vakuum: <10⁻⁴ mbar bei 293 K, Langzeit-Permanentvakuum
 Absicherung: Vakuum: Adsorbens und Getter
 Kupplungen: Johnston-Steckkupplung oder Schweißkupplung
 jeweils Typ Cryotherm

CRYOTHERM GmbH & Co. KG
 Euteneuen 4
 57548 Kirchen / Sieg
 Geschäftsführer: Peter Sora
 Amtsgericht Montabaur, Reg.-Nr. HRA 3995
 USt-ID: DE 812825420
 www.cryotherm.de

Qualitätsmanage-
 mentsystem
 zertifiziert nach
 ISO 9001



UniCredit Bank AG Köln (Euro)
 SWIFT-Code: HYVEDE33
 IBAN-Code: DE40 3702 0090 0021 9545 00

Deutsche Bank AG
 SWIFT-Code: DEUTDE33HAN
 IBAN-Code: DE50 4607 0090 0000 0760 00

Commerzbank AG
 SWIFT-Code: COBADE33HAN
 IBAN-Code: DE56 4604 0033 0019 2718 00

Page 1 / 4

Quotation
No.: 11141294



15.04.2019

Pos.	Item	Quantity	QU	Unit price	Total price
	Betriebsdruck: bei Steckkupplung: max. 8 bar bei Schweißkupplung: max. 18 bar Wärmeeinfall: 0,45 W/m <u>bestehend aus folgenden Komponenten:</u>				
1,0	78202048/A Transferline DN14, rigid, per metre	12,000	m	53,41	640,92 EUR
				delivery time	8 weeks
2,0	78202050/A Vacuum element DN14, rigid< 3,3m	4,00	pc.	734,00	2.936,00 EUR
				delivery time	8 weeks
3,0	78202059/A End piece DN14, R 1/2" male thread	8,00	pc.	156,50	1.252,00 EUR
				delivery time	8 weeks
4,0	79404896 Sleeve reduced 1/2 - 3/8 Bā.-Nr. 3240	1,00	pc.	26,24	26,24 EUR
				delivery time	8 weeks
5,0	79414404 Superinsulated Transferline, operating manual	1,00	pc.	29,13	29,13 EUR
				delivery time	8 weeks

CRYOTHERM GmbH & Co. KG
Eulensleben 4
57548 Kirchen / Sieg
Geschäftsführer: Peter Sara
Amtsgericht Montabaur Reg.-Nr. HRA 3995
USt-ID: DE 812825420
www.cryotherm.de

Qualitätsmanage-
mentssystem
zertifiziert nach
ISO 9001



Managementsystem
ISO 9001:2008
www.tuv.com
DE 00 000001

UniCredit Bank AG Köln (Euro)
SWIFT-Code: HYVEDE33
IBAN-Code: DE40 3702 0090 0001 9545 00
Deutsche Bank AG
SWIFT-Code: DEUTDE33
IBAN-Code: DE88 4507 0090 0030 0760 00
Commerzbank Sien
SWIFT-Code: COBADE33
IBAN-Code: DE55 4504 0033 0819 2718 00

Page 2 / 4

Quotation
No.: 11141294



15.04.2019

Pos.	Item	Quantity	QU	Unit price	Total price
6,0	78400920 Projectengineering on hourly basis Creation of an isometric sketch of vacuum superinsulated transferline systems delivery time 8 weeks	2,00	h	130,00	260,00 EUR
7,0	78400554 Proportional packing and shipping costs Place of delivery: ES-08930 Sant Adria de Besos (Barcelona) delivery time 8 weeks	1,00	pc.	500,00	500,00 EUR

CRYOTHERM GmbH & Co. KG
Euteneulen 4
57548 Kirchen / Sieg
Geschäftsführer: Felix Slara
Amtsgericht Montabaur, Reg.-Nr. HRA 3995
USt-ID: DE 812825420
www.cryotherm.de

Qualitätsmanage-
mentsystem
zertifiziert nach
ISO 9001



Management
System
ISO 9001:2008
www.tuv.com
ID: 89 00000000

UniCredit Bank AG Köln (Euro)
SWIFT-Code: HYVEDE33
IBAN-Code: DE40 3702 0090 0021 9545 00

Deutsche Bank AG
SWIFT-Code: DEUTDE33
IBAN-Code: DE89 4607 0090 0030 0780 00

Commerzbank Siegen
SWIFT-Code: COBADE33
IBAN-Code: DE56 4604 0030 0819 2718 00

Page 3 / 4

Quotation
No.: 11141294

Cryotherm

15.04.2019

Pos.	Item	Quantity	QU	Unit price	Total price
------	------	----------	----	------------	-------------

Item Sum	5.644,29 EUR
Sum surcharge	0,00 EUR
Net value:	5.644,29 EUR
VAT: 19,00%	1.072,42 EUR
Total Amount:	6.716,71 EUR


Terms of payment:


Terms of delivery: ex works
Terms of payment: cash in advance

Incoterm: EXW

Subject to prior sale
Our general terms and conditions can be found at www.cryotherm.de

Best regards,
Cryotherm GmbH & Co. KG


Nadine Pfeifer
Sales Department


Stefanie Graf
Sales Department



CRYOTHERM GmbH & Co. KG
Erdeneuen 4
57548 Kirchen / Sieg
Geschäftsführer: Peter Sura
Amtsgericht Morsbaur, Reg.-Nr. HRA 3995
USt-ID: DE 812825420
www.cryotherm.de

Qualitätsmanage-
mentssystem
zertifiziert nach
ISO 9001



Management
System
ISO 9001:2008
www.tuv.com
DE 29 30000-01

UniCredit Bank AG Köln (Euro)
SWIFT-Code: HYVEDE33
IBAN-Code: DE40 3702 0090 0021 9545 00

Deutsche Bank AG
SWIFT-Code: DEUTDE33
IBAN-Code: DEB9 4607 0090 0030 0780 00

Commerzbank Slogan
SWIFT-Code: COBADE33
IBAN-Code: DE56 4604 0033 0819 2718 00

Page 4 / 4

12.3. Catàleg Transductor PX 1005 - OMEGA

THIN-FILM CRYOGENIC PRESSURE TRANSDUCER

mV/V Output
0-15 to 0-1000 psi
0-1 to 0-70 bar

1 bar = 14.5 psi
1 kg/cm² = 14.22 psi
1 atmosphere = 14.7 psi = 29.93
inHg = 760.2 mmHg = 1.014 bar

PX1005 Series
All Ranges



- ✓ High Performance
- ✓ High Reliability
- ✓ 0.1% Stability for 18 Months
- ✓ Operates From -196 to 149°C (-320 to 300°F)
- ✓ Exceptional Calibration Stability

OMEGA's PX1005 sputtered thin-film pressure transducer was designed for cryogenic service; it can operate in temperatures from -196 to 149°C (-320 to 300°F). Yet, even in these extreme temperatures, it provides outstanding accuracy, long-term calibration stability, and reliability.

Static accuracy is ±0.25%, and thermal zero and sensitivity shifts over the compensated range of -196 to 27°C (-320 to 80°F) are less than ±0.01%/°F. The all-welded stainless steel pressure cavity and double-isolated case ensure reliability in the inherently tough environments of cryogenic service.

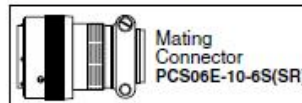
OMEGA's thin-film technology makes this premium performance possible. The strain gages are sputter-deposited, forming a molecular bond with the substrate. There is virtually no shift, drift, or creep to cause the transducer's calibration to change.



Applications

- ✓ Liquid-Fuel Engines and Test Stands
- ✓ Launch System Ground Support Equipment
- ✓ Space Systems
- ✓ Cryogenic Process Instrumentation Tested to -196°C (-320°F)

OMEGA's PX1005 is available in many standard ranges from 15 psi to 1000 psi. A calibration record is supplied with every unit.



To Order

Models with mV/V Output and Bendix Connector			
RANGE		MODEL NO.	COMPATIBLE METERS*
Absolute Pressure (All Ranges Available in Sealed Gage Pressure)			
0 to 15 psi	0 to 1.0 bar	PX1005L1-015AV	DP41-S, DP25B-S
0 to 25 psi	0 to 1.7 bar	PX1005L1-025AV	DP41-S, DP25B-S
0 to 50 psi	0 to 3.4 bar	PX1005L1-050AV	DP41-S, DP25B-S
0 to 100 psi	0 to 6.9 bar	PX1005L1-100AV	DP41-S, DP25B-S
0 to 250 psi	0 to 17.2 bar	PX1005L1-250AV	DP41-S, DP25B-S
0 to 500 psi	0 to 34.5 bar	PX1005L1-500AV	DP41-S, DP25B-S
0 to 1000 psi	0 to 68.9 bar	PX1005L1-1KAV	DP41-S, DP25B-S

Comes complete with 5-point calibration.

* Visit us online for compatible meters.

Metric ranges available – Consult Engineering.

To order sealed gage pressure, replace "A" in model number with "S" (no extra charge).

Ordering Examples: PX1005L1-100AV, 100 psi absolute pressure transducer, with MS33656-4 male pressure connection and integral electrical connector.

PCS06E-10-6S(SR), mating connector (sold separately).

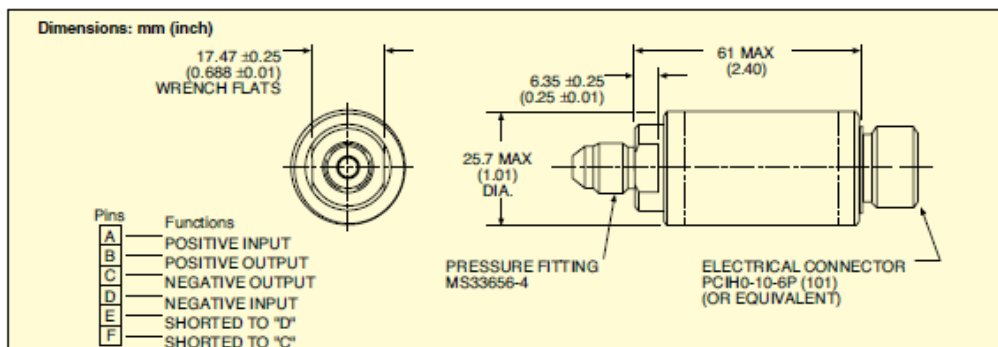
PX1005L1-1KSV, 1000 psi sealed gage pressure transducer with MS33656-4 male pressure connection and integral electrical connector. PCS06E-10-6S(SR), mating connector (sold separately).

ACCESSORY

MODEL NO.	DESCRIPTION
PCS06E-10-6S(SR)	Mating connector for PX1005 transducers

B-77

THIN-FILM CRYOGENIC PRESSURE TRANSDUCER



SPECIFICATIONS

Excitation: 10 Vdc

Full Range Output:

30 mV nominal, 26 mV minimum

Residual Unbalance:

0 mV ±5% FSO at zero pressure

Input Resistance: 400 Ω nominal

Output Resistance: 400 Ω nominal

Insulation Resistance:

100 MΩ or greater @ 45 Vdc

Shunt Calibration: Provisions for single-arm, external shunt calibration

Sensing Element: 4-active-arm

bridge using sputter-deposited thin-film elements.

Accuracy: Combined linearity,

hysteresis and repeatability: ±0.25% FSO, BSL [Note: Performance is

determined at 25°C ±1°C (77°F ±2°F), open circuit, rated excitation, unless otherwise specified]

Operating Temp Range:

-196 to 149°C (-320 to 300°F)

Compensated Temp Range:

-196 to 27°C (-320 to 80°F)

Thermal Effects:

Span: ±0.01% FSO/°F

Zero: ±0.01% FSO/°F

Vibration Sensitivity: At 35 g peak

from 10 Hz to 2000 Hz (½" D.A.),

the output shall not exceed 0.04%

FSO/g for 15 psi units decreasing

logarithmically to 0.003% FSO/g for

1000 psi units

Natural Frequency: 35 kHz at 1000 psi

decreasing logarithmically 5 kHz at 15 psi

Shock: 100 g, 11 ms half sine wave

without calibration shift or damage

Humidity: Per MIL-STD-810, method 507.1

Standard Ranges: 0 to 15, 25, 50, 100, 250, 500 and 1000 psia

Proof Pressure: 200% of rated pressure will not cause changes in performance beyond the specified tolerances

Burst Pressure: 3 times rated pressure

Wetted Parts: 17-4 PH vacuum melt or 15-5 PH stainless steel

Pressure Fitting:

½"-20 male per MS33656-4

Mounting Isolation: Case isolation

ensures that the sensing element will

not be affected by external stresses

Mating Connector:

PCS06E-10-6S(SR) (sold separately)

Weight: 145 g (5 oz) maximum

CUSTOM CONFIGURATIONS

PX1005 SERIES	PRESSURE PORT [1]	ELECTRICAL CONNECTION [2]	RANGE [3]	UNITS [4]	OUTPUT [5]	OPTIONS [6]
	L = MS33656-4		015 psi	A, S	V = mV/V Output	
			025	A, S		
			050	A, S		
			100	A, S		
			250	A, S		
			500	A, S		
			1K	A, S		
	1 = PCIH0-10-6P connector (or equal).					
	Mating connector (sold separately), order PCS06E-10-6S(SR)					
Metric ranges available – Consult Engineering.						
To order a custom configuration: 1. Select a pressure port 2. Select electrical connection 3. Select a pressure range 4. Select pressure units 5. Select output 6. Select options and agency approvals						

Ordering Examples: PX1005L1-100AV, MS33656-4 male pressure port, PCIH0-10-6P connector, 100 psi absolute pressure range and mV/V output. PCS06E-10-6S(SR), mating connector (sold separately).

PX1005L1-015SV, MS33656-4 male pressure port, PCIH0-10-6P style connector, 15 psi sealed gage pressure range and mV/V output.

PCS06E-10-6S(SR), mating connector (sold separately).

PX1005L1-1KSV, MS33656-4 male pressure port, PCIH0-10-6P connector, 1000 psi sealed gage pressure range and mV/V output.

PCS06E-10-6S(SR), mating connector (sold separately).

12.4. Catàleg Manòmetre Media 05 - SAMSON

DATA SHEET

T 9519 EN

Media 5 Differential Pressure and Flow Meter

Indicator 160 Ø · PN 50



Application

Transmitter for measuring and indicating the differential pressure or measured variables derived from it · Suitable for gases or liquids · Measuring ranges between 0 to 40 and 0 to 3600 mbar · Static pressures up to 50 bar · Optionally with limit switch including three inductive alarm contacts or with 4 to 20 mA current output

Measurement tasks

- Liquid level measurement in pressure tanks, especially for cryogenic gases
- Differential pressure measurement between flow and return flow pipe
- Pressure drop measurement across valves and filters
- Flow rate measurement according to the differential pressure method

Special features

- Suitable for liquids, gases or vapors
- Overloadable on one side up to the permissible static pressure
- Suitable for field installation (degree of protection IP 54/ IP 65) and panel mounting
- Zero adjustment from the front
- Adjustment of measuring span 1:2
- Housing of indicating unit with burst protection
- Limit switch and current output easy to retrofit
- Directly connectable (flange) valve block (optional) with connection to monitor the tank pressure and with connection for pressure switch

Media 5 consisting of:

Indicator NG 160 with pointer mechanism · dp cell made of CW617N (brass) or stainless steel, PN 50 · Free of oil and grease for oxygen · Measuring ranges from 40 to 3600 mbar ECO measuring diaphragm · Zero adjustment at the front

Optionally available with accessories:

- Dials
- Scale 0 to 100 % linear or square root graduation, dial plates according to DIN EN 837-3, detachable dial plates for different media, special dial plates
- Valve block which can be directly mounted onto Media 5 devices
- Screw fittings
- Pressure gauge
- Inductive limit switch with max. three alarm contacts A1/

SAMSON AKTIENGESELLSCHAFT · Weismüllerstraße 3 · 60314 Frankfurt am Main, Germany
Phone: +49 69 4009-0 · Fax: +49 69 4009-1507 · samson@samson.de · www.samson.de

Edition August 2016



Media 5 with 4 to 20 mA current output (optional)



Media 5 with limit switch (optional)

Fig. 1: Media 5, indicator Ø 160 mm with attached valve block and pressure gauge for operating pressure

- A2/A3 (proximity switches) · Version for hazardous locations
- 4 to 20 mA current output

Special versions on request

Principle of operation (Fig. 2)

Media 5 with limit switch (optional)

The dp cell works according to the deflection method and contains an ECO measuring diaphragm (1.5) which is designed to handle measuring spans from 40 to 3600 mbar. The diaphragm stem (1.7) is connected to a lever (1.8) and is supported and guided by the range springs. The lever leads the deflection of the measuring system out of the pressure chamber. The pressure chamber is sealed by a flexible disk (1.9). The range springs, which are connected to the housing and the diaphragm ensure that the position of the lever is independent of the static pressure. The dp cell can be overloaded on one side as the measuring diaphragm flexes against the housing wall whenever the measured values are out of range.

The differential pressure $\Delta p = p_1 - p_2$ creates a force at the measuring diaphragm (1.5), which is opposed by the range springs (1.4). The movement of the measuring diaphragm and lever (1.8), which is proportional to the differential pressure, is transferred by the adjustable transmission element (2.1) and pointer mechanism equipped with jewel bearings (2.2) to the pointer (2.4).

The range springs (1.4) installed in the dp cell determine the upper and lower limit of each measuring span (measuring span limit) of the device. The span can be continuously adjusted within these limits in the ratio of 1:2 at the transmission element. This adjustment changes the transmission ratio between the lever (1.8) and the pointer mechanism (2.2).

Depending on the direction of action, the shaft of measuring unit (3.1) bears the metal tags (3.2) and moves them into the limit switch with the two alarm contacts (proximity switches) A1 and A2 (3.3).

If the metal tag enters the inductive field of the associated proximity switch, it assumes a high resistance (contact open). If the metal tag leaves the inductive field, it assumes a low resistance (contact closed). This function is similar to that of a mechanical-type switching contact.

The proximity switches can be adjusted independently from one another. They provide a signal when the differential pressure either increases or decreases and the metal tags enter or leave the inductive field of the switch. The proximity switches have a LED indicator, allowing the limit values to be easily adjusted on site.

Isolating switch amplifiers conforming to EN 60947-5-6 must be connected in the output circuit of the inductive alarm contacts A1/A2 to ensure they meet the operational requirements of any connected control and signaling equipment.

Media 5 with current output (optional)

The option module with 4 to 20 mA current output upgrades the analog reading of the Media 5 by issuing a 4 to 20 mA current signal which can be used for electric signal transmission and further processing. The measuring signal, which is proportional to the pointer deflection, is automatically calibrated with the mechanical reading. As a result, a deflection of 270° corresponds to an output signal of 20 mA.

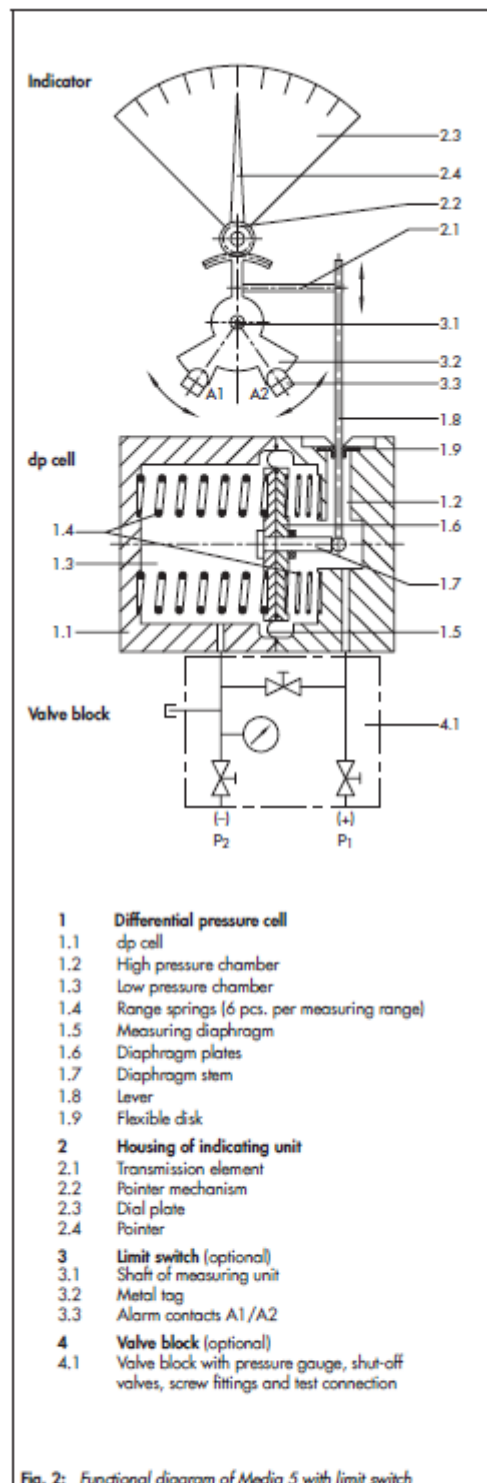



Fig. 2: Functional diagram of Media 5 with limit switch

Table 1: Technical data - All pressure stated as gauge pressure

Table 1: Technical data - Air pressure stated as gauge pressure

Media 5 Differential Pressure and Flow Meter											
Measuring range in mbar		0 to 60	0 to 100	0 to 160	0 to 250	0 to 400	0 to 600	0 to 1000	0 to 1600	0 to 2500	0 to 3600
Measuring span in mbar	min. max.	40 to 60	50 to 100	80 to 160	125 to 250	200 to 400	300 to 600	500 to 1000	800 to 1600	1250 to 2500	1800 to 3600
Accuracy class		±4.0 %	±2.5 %		±1.6 %						
Nominal pressure	PN 50, overloadable on one side up to 50 bar										
Indicator	Ø160 mm										
Characteristic	Reading linear to the differential pressure										
Deviation from terminal-based linearity	<±2.5 %	<±1.6 % including hysteresis									
Sensitivity	<±0.5 %	<±0.25 %									
Effect of static pressure	<0.03 %/1 bar										
Degree of protection according to DIN EN 60529	IP 54										
Weight	Approx. 3 kg without valve block Approx. 5 kg with valve block										
Compliance											
Limit switch (optional)											
Limit contacts	Max. 3 alarm contacts A1, A2 and A3 with inductive pick-up and LED according to EN 60947-5-6										
Control circuit	Values corresponding to connected isolating switch amplifier according to EN 60947-5-6, e.g. KFA6-SR2-Ex2.W										
Proximity switch	SJ3,5-N-LED, for hazardous areas according to PTB 99 ATEX 2219X										
Switching accuracy	<±2 %										
Dead band, approx.	<0.6 %										
4 to 20 mA current output (optional)											
Version	Magnetoresistive measuring system										
Supply voltage U_s	12 to 36 V (DC)										
Output signal	4 to 20 mA, two-wire system										
Perm. load R_b in Ω	$R_b = (U_s - 12 \text{ V}) / 0.020 \text{ A}$ ($R \leq 600 \Omega$ at 24 V and 20 mA)										
Power consumption	103 mW										
Settings	Zero calibration Span calibration Characteristic selection Test function										
Characteristic	Output and reading linear or square root extraction depending on installed flow characteristic Characteristic set at the factory										
Deviation from terminal-based linearity	<±0.2 %, related to 270° measuring span										
Sensitivity	<±0.05 %, related to 270° measuring span										
Effect of ambient temperature in the range from -40 to +80 °C	<0.1 %/10 K for zero and span										
Ambient conditions											
Perm. ambient temperature range	-40 to +80 °C										
Perm. storage temperature range	-40 to +100 °C										
Use of Media 5 with gaseous oxygen											
Max. oxygen pressure	50 bar										
Perm. ambient temperature range	-40 to +60 °C										

Note

- All pressure stated as gauge pressure
- All errors and deviations are specified in % of the adjusted measuring span.
- The Media 5 Differential Pressure and Flow Meter without limit switches may be used to measure flammable gases and liquids in which hazardous area conditions of Zone 0 are to be expected. The relevant regulations on the measurement of flammable gases and liquids of Zone 0 must be observed.
- Oxygen service: When the device is used for oxygen service, make sure that the dp cell and any SAMSON accessories (e.g. valve block) only come into contact with gaseous oxygen.
- Refer to ► EB 9519 for more details.

12.5. Catàleg vàlvula 3241-7 - SAMSON

DATA SHEET

T 8015 EN

Series 240 · Type 3241-1 and Type 3241-7 Pneumatic Control Valves

Type 3241 Globe Valve · DIN version



Application

Control valve for process engineering and industrial applications

Nominal size DN 15 to 300

Nominal pressure PN 10 to 40

Temperatures -196 to 450 °C

Type 3241 Globe Valve operated with

- Type 3271 Pneumatic Actuator (Type 3241-1 Control Valve) or
- Type 3277 Pneumatic Actuator (Type 3241-7 Control Valve)

Valve body made of

- Cast iron
- Spheroidal graphite iron
- Cast steel, cast stainless steel or cast cold-resisting steel
- Forged steel or forged stainless steel
- Special materials

Undivided valve bonnet up to DN 150

Valve plug

- Metal seal
- Soft seal
- High-performance metal seal

The control valves, designed according to the modular assembly principle, can be equipped with various accessories:

Positioners, limit switches, solenoid valves and other accessories according to IEC 60534-6-1 and NAMUR recommendation. Refer to Information Sheet ▶ T 8350 for more details.

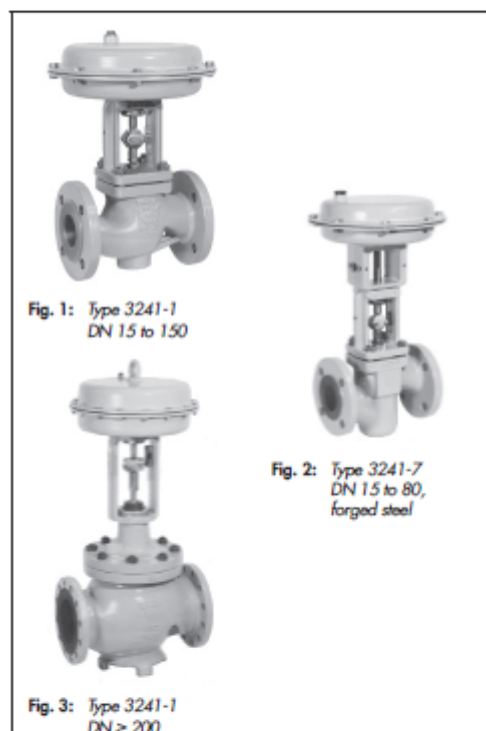
Versions

Standard version for temperatures ranging from -10 to 220 °C

- Type 3241-1 (Figs. 1 and 3) · DN 15 to 300 with Type 3271 Pneumatic Actuator (see Data Sheets ▶ T 8310-1, ▶ T 8310-2, ▶ T 8310-3)
- Type 3241-7 (Fig. 2) · DN 15 to 150 with Type 3277 Pneumatic Actuator for integral positioner attachment (see Data Sheet ▶ T 8310-1)

Further versions

- Welding ends
- Adjustable packing · See Information Sheet ▶ T 8000-1
- Flow divider or AC-1/AC-2 Trim for noise reduction · See ▶ T 8081 and ▶ T 8082



- Perforated plug · See ▶ T 8086
- Valve plug with pressure balancing · See Technical data
- Insulating section or bellows seal · See Technical data
- Heating jacket · On request
- Stainless steel actuator · See ▶ T 8310-1
- Additional handwheel · See ▶ T 8310-1, ▶ T 8310-2 and ▶ T 8310-3

- **Type 3241 PSA** - Version for pressure swing adsorption plants - See ▶ T 8015-1 and ▶ T 8012-1
- **Typetested version** - For heating systems (see ▶ T 8016) or DIN/DVGW-tested version for gas (see ▶ T 8020)
- **ANSI version** - See ▶ T 8012
- **Versions with dimensions according to Japanese Industry Standard (JIS)** - Details on request

Principle of operation

The medium flows through the valve in the direction indicated by the arrow on the body. The valve plug position determines the cross-sectional area between the seat and plug.

Fail-safe position

Depending on how the springs are arranged in the pneumatic actuator (see Data Sheets ▶ T 8310-1 and ▶ T 8310-2), the valve has two different fail-safe positions effective upon air supply failure.

- **Actuator stem extends (fail-close)**
The valve closes when the supply air fails.
- **Actuator stem retracts (fail-open)**
The valve opens when the supply air fails.

Differential pressures

Permissible differential pressures are listed in Information Sheet ▶ T 8000-4.

Note

Fig. 4 to Fig. 7 show configuration examples.

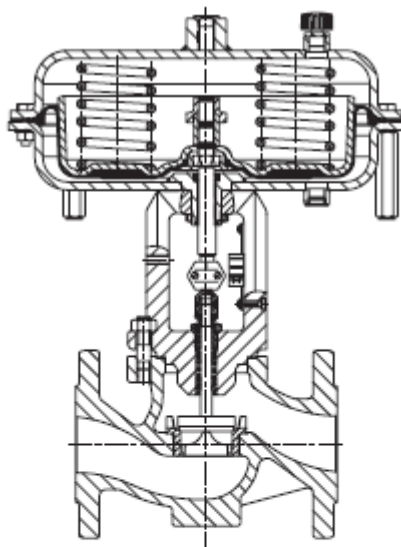


Fig. 4: Type 3241-1 Control Valve,
DN 15 to 150, with Type 3271 Actuator

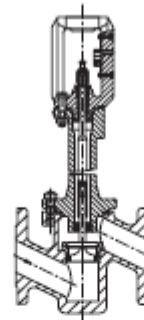


Fig. 5: Type 3241 Valve, forged steel version,
DN 15 to 80, with insulating section

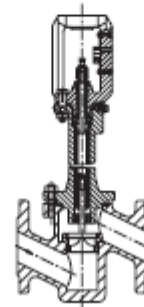


Fig. 6: Type 3241 Valve, forged steel version,
DN 15 to 80, with bellows seal

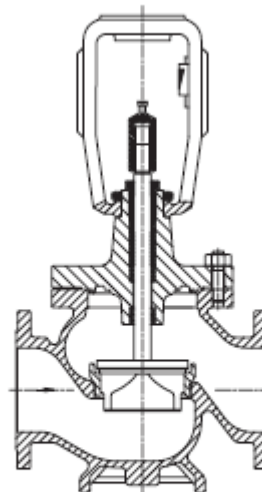



Fig. 7: Type 3241 Valve, DN 200 to 300

Table 1: Technical data for Type 3241

Nominal size	DN	15 to 250	15 to 150	15 to 300				15 · 25 · 40 · 50 · 80	
Material		Cast iron EN-GJL-250 (EN-JL1040)	Sph. graphite iron EN-GJS- 400-18-LT (EN-JS1049)	Cast steel 1.0619	Cast stain- less steel 1.4408	Cast steel 1.6220/ 1.1138	Cast stain- less steel 1.4308	Forged steel 1.0460	Forged stainless steel 1.4571
Nom. pressure	PN	10 · 16	16 · 25	10 · 16 · 25 · 40					
Type of end connection	Flanges	All DIN versions							
	Welding ends	-		DIN EN 12627 only for DN 25, 40, 50, 80, 100, 150, 200, 250, 300				-	
Seat/plug seal		Metal seal · Soft seal · High-performance metal seal							
Characteristic		Equal percentage · Linear (according to Information Sheet ► T 8000-3)							
Rangeability		50:1 for DN 15 to 50 · 30:1 for DN 65 to 150 · 50:1 for DN 200 and larger							
Heating jacket	Up to DN 100	PN 25							
	≥DN 125	PN 16							
Compliance									
Temperature ranges in °C · Permissible operating pressures acc. to pressure-temperature diagrams (see Information Sheet ► T 8000-2)									
Body without insulating section		-10 to +220							
Body with	Insulating section	-10 to +300	-10 to +350	-10 to +400 ¹⁾	-50 to +450 ²⁾	-50 to +300	-50 to +300 ³⁾	-10 to +400	-50 to +450
	Long ²⁾	-	-	-	-196 to +450	-	-196 to +300	-	-196 to +450
	Bellows seal	-10 to +300	-10 to +350	-10 to +400 ¹⁾	-50 to +450 ²⁾	-50 to +300	-50 to +300 ³⁾	-10 to +400	-50 to +450
	Long ²⁾	-	-	-	-196 to +450	-	-196 to +300	-	-196 to +450
Valve plug	Standard	Metal seal							
		-196 to 450							
	Soft seal	-196 to 220							
	With PTFE ring	-50 to 220 · Lower temperatures on request							
Balanced	With graphite ring	220 to 450							
Leakage class according to IEC 60534-4									
Valve plug	Metal seal	Standard: IV · High-performance metal seal: V ⁴⁾							
	Soft seal	VI							
Valve plug	Balanced	Standard: IV · With PTFE or graphite pressure-balancing ring							
	Metal seal	Special version: V · For high-performance metal seal (only with PTFE balancing ring) on request							

¹⁾ Special version: temperature range extended up to 450 °C when cast steel 1.0619 is used for pressure-bearing parts

²⁾ DN 200 and larger: down to -196 °C

³⁾ Long insulating section and bellows seal up to DN 150

⁴⁾ Leakage class V for temperatures lower than -50 °C on request

Table 2: Materials

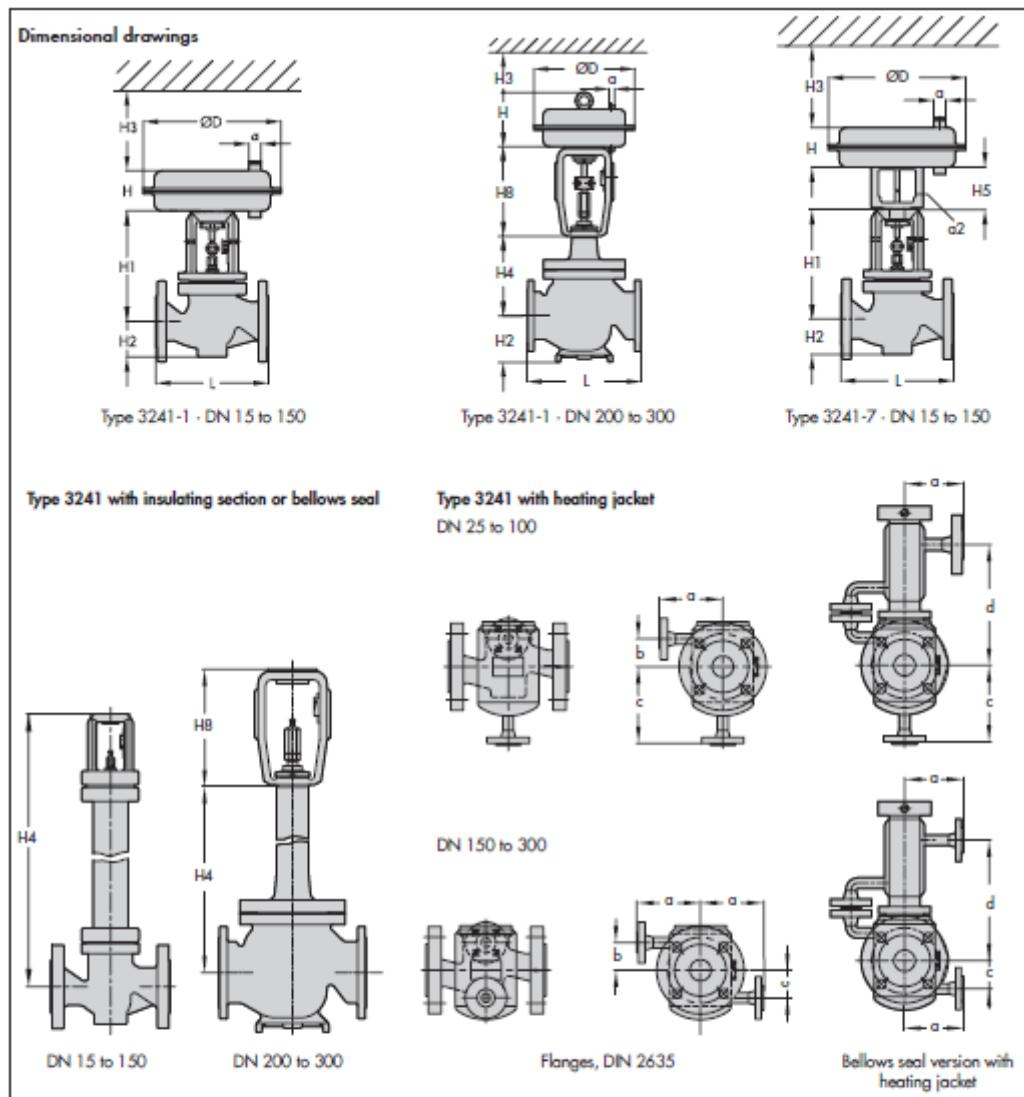
Standard version								
Valve body ¹⁾	Cast iron EN-GJL-250 (EN-JL1040)	Sph. graphite iron EN-GJS- 400-18-LT (EN-JS1049)	Cast steel 1.0619	Cast stainless steel 1.4408	Cast steel 1.6220/ 1.1138	Cast stainless steel 1.4308	Forged steel 1.0460	Forged stainless steel 1.4571
Valve bonnet	1.0460/ EN-GJL-250	1.0460/1.0619		1.4408/ 1.4401/ 1.4404	1.0566/ 1.6220	1.4308/ 1.4301	1.0460	1.4401/ 1.4404
Seat ²⁾	1.4006/1.4008			1.4404/ 1.4409	1.4006/ 1.4008	1.4301/ 1.4308	1.4006/ 1.4008	1.4404/ 1.4409
Plug ²⁾	1.4006 (1.4404)/1.4008			1.4404/ 1.4409	1.4006 (1.4404)/ 1.4008	1.4301/ 1.4308	1.4006 (1.4404)/ 1.4008	1.4404/ 1.4409
Plug seal	Seal ring for soft-seated plug: PTFE with glass fiber							
	Seal ring for balanced plug: PTFE with carbon or graphite ring						-	
Guide bushing	1.4104			1.4404	1.4404	1.4301	1.4104	1.4404
Packing ³⁾	V-ring packing: PTFE with carbon · Spring: 1.4310							
Body gasket	Graphite on metal core							
Insulating section	1.0460			1.4401/ 1.4404	1.0566	1.4301	1.0460	1.4401/ 1.4404
Bellows seal	Intermediate piece			1.4401/ 1.4404	1.0566	1.4301	1.0460	1.4401/ 1.4404
	Metal bellows			1.4571 ⁴⁾		1.4541	1.4571 ⁴⁾	
Heating jacket	-			1.4404				

¹⁾ Special materials for applications with sea water: 1.4538, duplex 1.4470; nickel-based alloy: 9.4610; other special materials on request.

²⁾ All seats and metal-seated plug also with Stellite® facing; for ≤ DN 100 plug up to seat bore 38 made of solid Stellite® available.

³⁾ Other packings on request (see ▶ T 8000-1).

⁴⁾ Other materials on request.



Ordering text

Globe valve	Type 3241, DN ..., PN ...
Body material	According to Table 2
Type of end connection	Flanges or welding ends
Seat and plug	Metal seal/soft seal/ high-performance metal seal
Characteristic	Equal percentage or linear
Pneumatic actuator	Type 3271 or Type 3277
Fail-safe position	Fail-close or fail-open

Process medium	Density and temperature
Max. flow rate	in kg/h oder m ³ /h
Pressure	p ₁ and p ₂ in bar (absolute pressure)
Accessories	Positioner/limit switch

Associated Information Sheet ► T 8000-x

Associated data sheets
for pneumatic actuators ► T 8310-1 to -3

Specifications subject to change without notice

T 8015 EN

2018-11-16 - English

12.6. Catàleg vàlvula de bola TRUNNION – SAMSON



TRUNNION MOUNTED



INDEPENDENT BALL AND STEM

Ball and stem are manufactured in two separate pieces to reduce the effect of the side load generated by the pressure acting on the ball.

ANTI-STATIC DEVICE

All valves are guaranteed for electrical continuity between all the metal components. Type tests are duly executed and valves are certified.



Trunnion mounted ball valves are based on a system that provide a fixed ball and floating seat rings, moving along the valve axis.

The side load given by the pressure acting on the ball is absorbed by the bearings. At low pressure the sealing on the seats is obtained by the spring action on the seat rings. The more the pressure increases, the more it pushes the seats against the ball.

DOUBLE BLOCK AND BLEED

Starline valves are supplied as standard execution in DOUBLE BLOCK & BLEED. Both seats hold the pressure independently from the body cavity pressure. Block and Bleed execution and Double Piston Effect execution are available as an option.

Starline trunnion mounted valves are available from 1/2" to 36" — ASME class 150 to 2500 — as well as API 6A 5000 and 15,000 — in several combinations of materials and execution to cover all possible service application from low temperature to high pressure.



3 PCS BOLTED CONSTRUCTION

The 3 pcs construction allows an infinite flexibility in the valve construction in terms of possible end connection combination.



Type in "StarlineAR" and DOWNLOAD NOW

AVAILABLE ON THE
App Store

ANDROID APP ON
Google Play

STARLINE
forged steel ball valves



METAL SEATED ABRASIVE SERVICE

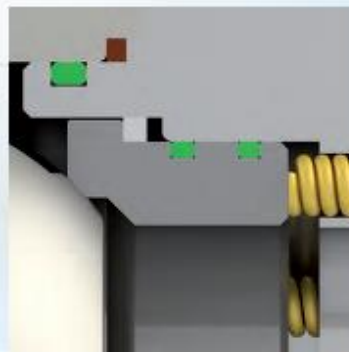
Valves designed for abrasive service and for resistance to wearing and abrasive media. This specific execution is using the same basic components of a normal **TRUNNION MOUNTED** valve and only modify the ball and seat material which are coated by min 150 microns of Tungsten and Chrome. On request this valve can be supplied with higher coating thickness up to 400 Microns. The coating treatment is fully certified according to the highest standard requirements. Starline can guarantee a tightness class according to ISO 5208 RATE A on all sizes and pressure ratings even with GAS TEST.

Tungsten Carbide Coating

Excellent resistance to wearing - good resistance to thermal shock. Max temperature +350°C. Do not use in presence of medium/high corrosion and water solutions.

Chrome Carbide Coating

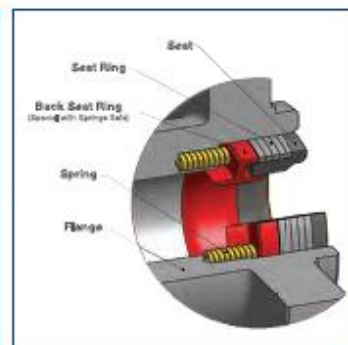
Excellent used for wearing, erosion and oxydation at high temperatures. Normally used on turbines. Max temperature +820°C.



Protected spring solution

For specifically aggressive service, where there is a problem of polymerization or presence of solid components.

Starline has specifically created a solution with protected springs to guarantee full service of the springs throughout the valve life.



METAL SEATED HIGH TEMPERATURE

For operation in temperatures that do not allow the use of resilient material, Starline has developed a specific design for high temperature. Valve is specifically equipped with a stem extension for insulation and is available in many different specific materials to face even extreme temperatures. Starline can guarantee a tightness class according to ISO 5208 RATE A on all sizes and pressure ratings even with GAS TEST.



This specific valve design has been successfully used for steam applications - thermal oil and other typical high temperature services.

STARLINE

LOW TEMPERATURE CRYOGENIC VALVE

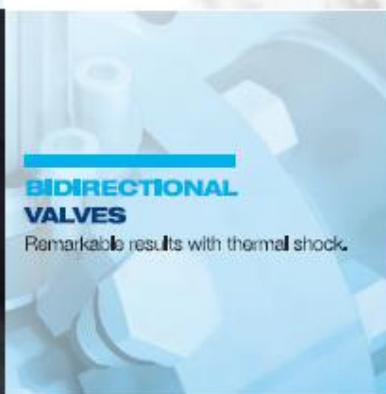
Fully designed to cover **BS6364** requirements for full tightness in medium and severe cryogenic service. This execution has been fully tested at **-196°**.

Extended stem length is adapted to the valve size according to **BS6364** – thermal fins isolate the stem tightness from the cold temperature.



BIDIRECTIONAL VALVES

Remarkable results with thermal shock.



LIP SEAL CONSTRUCTION

Lip seal design guarantees a full capability to cover any possible service requirement with a good tightness and long life guarantee. Lip seal design made of **PTFE** sealing with **ELGILOY** springs.

Lip seal design is a good alternative where special O-rings are required to cover high percentages of amine or methanol, or where high or low temperatures are too stringent. Valves require a specific design with modified machining criteria to maintain a high quality performance at all levels. Available for temperatures from minus 100°C to plus 320°C.

STARLINE
forged steel ball valves



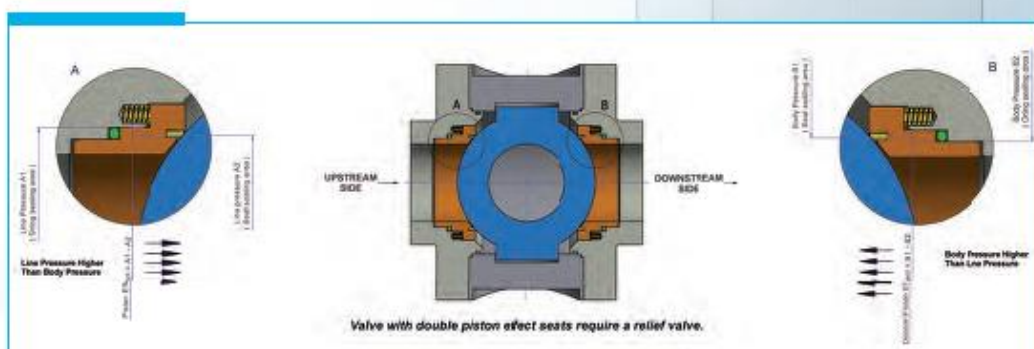
DOUBLE PISTON EFFECT

This valve is required only for special applications where the automatic body cavity relief of the trunnion mounted valves needs to be controlled, limited to upstream side or handled in every different way.

DPE seat design allows for both seats to seal with pressure acting from the same side of the valve. In the event of one seat becomes damaged, the used has the added advantage of the opposite seat sealing.

RELIEF DETAIL

Starline provide a personalized relief valve - designed and manufactured directly - fully tested for high cycle performance.



STARLINE



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH

Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

12.7. Catàleg canonades - CRYOTHERM



Contacto

Cryotherm GmbH & Co. KG
Euteneusen 4
D-57548 Kircheln
Fon: +49 (0)2741 9585-0
Fax: +49 (0)2741 6900
E-Mail: info@cryotherm.de
www.cryotherm.de



02.16

¡Se reserva el derecho de realizar las modificaciones técnicas oportunas!



Sistemas de tuberías criogénicas

Lo frío permanece frío –
donde Usted quiera



www.cryotherm.de

Gases líquidos criogénicos...

Sistemas de tuberías flexibles y rígidas

... como nitrógeno, oxígeno y argón se almacenan en recipientes de almacenamiento especiales.



El módulo apropiado para cada planteamiento

Cryotherm ofrece sistemas de tuberías de transferencia así como el equipamiento correspondiente, para que los gases lleguen desde los recipientes al punto de uso con las mínimas pérdidas de evaporación posibles.

Estamos a su servicio desde el comienzo, para que su proyecto se lleve a cabo en un periodo muy corto y Usted se pueda beneficiar inmediatamente de las ventajas económicas. De forma conjunta llevamos a cabo la planificación, el diseño y el montaje del sistema de tuberías criogénicas, adaptándolo a sus necesidades.

Nuestro sistema modular diseñado especialmente para los diámetros DN 14 y DN 25 es idóneo para los más diversos planteamientos y disponible en stock en las longitudes 3,6 y 12 m.

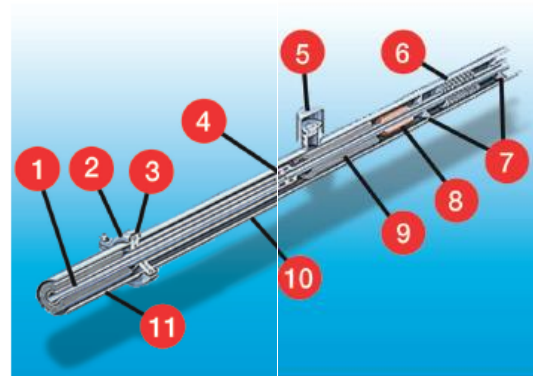
Características generales de construcción

- Construcción soldada de acero inoxidable antimagnético, altamente resistente a la corrosión
- Tuberías rígidas o flexibles
- Piezas de acoplamiento superaisladas para posibilitar la flexible ampliación y combinación del sistema

- Acoplamientos de conexión rápida así como acoplamientos de soldadura instalados de forma permanente
- Largo periodo de funcionamiento del sistema de aislamiento al vacío gracias al uso de material de adsorción y gétters (afinadores de vacío)
- Control de calidad en cada fase de la producción
- Pruebas de fugas de la tubería interior y de la tubería exterior

Alta eficiencia térmica

Gracias a una eficiencia térmica optimizada mediante diseño asistido por ordenador y el superaislamiento de vacío multicapa entre la tubería interior y la tubería exterior.



Esenciales características de construcción

- 1 Tubería interior de acero especial para usos criogénicos a bajas temperaturas y altamente resistente a la corrosión (1.4301), completamente soldada
- 2 Breda de unión compuesta por anillo de apriete y tornillos de fijación
- 3 Empaquetadura anular
- 4 Junta fría
- 5 El cierre al vacío combinado con el dispositivo de seguridad protege el espacio de vacío de una presión indebidamente alta
- 6 Compensador de dilatación para compensar las alteraciones térmicas de longitud
- 7 Inmovilización de distancia: distanciador entre la tubería interior y exterior
- 8 Material de adsorción
- 9 Aislamiento de vacío multicapa gracias al diseño termodinámico optimizado por ordenador
- 10 Segmentos de tubería 1 y 2; al vacío
- 11 Superaisladas, sistema circuito cerrado de vacío

Sistemas de tuberías flexibles

Pieza de tubería flexible superaislada al vacío DN 20 con conexión de acoplamiento DN 14



Sistemas de tuberías rígidas

Elementos rectos de tubería superaislados al vacío y codos con conexión de acoplamiento DN 14



Ventajas de sistemas de tuberías flexibles y rígidas

- Diseño agradable
- Hechas de acero inoxidable antimagnético altamente resistente a la corrosión y por lo tanto utilizables también en salas limpias y en la industria de alimentación
- Ampliables y combinables sin problemas gracias a la utilización de acoplamientos conectables
- Largo periodo de funcionamiento del vacío aislador gracias al uso de material de adsorción y gétters (afinadores de vacío) especiales, reduciendo de este modo su consumo de gas y prolongando los intervalos de revisión.

Separadores de gases y separadores de fases

Datos técnicos

Separadores de gas y separadores de fases superaislados

Separadores de fases y separadores de gas

Estos equipos tienen la función de separar de la fase líquida el gas generado durante el transporte de los líquidos criogénicos hasta con el mejor aislamiento y de evacuarlo del sistema de tuberías. Para mayor funcionalidad se posicionan en la proximidad inmediata al punto de uso.

Separadores de gases superaislados

- Económicos en caso de extracción continua
- La tubería completa entre el punto de alimentación (p.ej. gasificador frío) y el punto de extracción se mantiene fría de forma permanente
- La presión de alimentación (p.ej. del gasificador frío) permanece constante hasta el punto de extracción
- Se colocan en el lugar más alto del sistema de tuberías
- Ideal para el gran consumidor



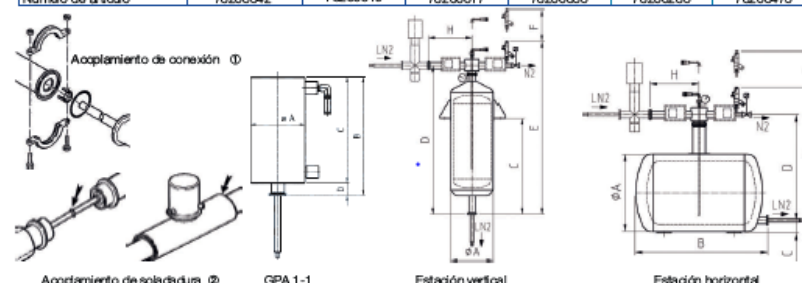
Separadores de fases superaislados

- Económicos en caso de extracción discontinua
- El segmento de tubería (en lo posible corto) entre el separador de fases y el punto de uso se mantiene frío continuamente
- Baja presión en el punto de uso (= altura geodésica de la columna de líquido)
- Se pueden colocar en cualquier lugar del sistema de tuberías
- Ideal para consumidores pequeños y/o múltiples puntos de uso
- Con funcionamiento de emergencia
- El sistema de separación más elegido



El sistema modular en resumen

	Separador(es) de gases		Estaciones de separación de fases con sistema de mantenimiento de presión			
	GPA 1-1		vertical		horizontal	
Volumen, geométrico [l]	5	50	100	50	100	200
Presión de trabajo [bares s.]	18	1,5/3	1,5/3	1,5/3	1,5/3	1,5/3
Peso vacío/leno [kg]	17/21	50/95	68/158	50/95	68/158	90/270
Ø A [mm]	219	340	450	450	550	650
B [mm]	480	-	-	740	940	1100
C [mm]	430	772	837	90	90	90
D [mm]	50	1192	1312	650	750	772
E [mm]	-	1380	1480	830	930	1280
F [mm]	-	270	270	350	350	270
H [mm]	-	350	350	350	350	450
Conexión de llenado	DN 14 F	DN 14 F	DN 14 F	DN 14 F	DN 14 F	DN 25 F
Conexión de extracción	DN 14 M	DN 14 M	DN 14 M	DN 14 M	DN 14 M	DN 25 M
Conexión de gas de escape	1/4" NPT	DN 25	DN 25	DN 25	DN 25	DN 25
Regulación de presión	manométrica	eléctrica	eléctrica	eléctrica	eléctrica	eléctrica
Número de artículo	78203542	78206619	78206617	78200335	78200285	78203475



Tuberías de transferencia/sistemas	Versión rígida				Versión flexible	
	DN 14	DN 25	DN 40	DN 50	DN 100	DN 200
Diámetro nominal	Ø14	Ø25	Ø40	Ø50	Ø100	Ø200
Tubo de conexión: Ø1=de conexión; Ø2=de soldadura	Ø14	Ø25	Ø40	Ø50	Ø100	Ø200
Tubo exterior [mm]	52	76,1	84	104	159	219
Ø exterior acoplamiento de soldadura [mm]	76,1	88,9	104	129	204	270
Calado de la pared e [mm]	150	200	250	250	300	400
Radio de doblado mínimo [mm]	-	-	-	-	400	500
Necesidad de montaje acopl. conector [mm]	300	400	400	450	300	400
Presión de trabajo recom. [bar]	8	8	8	8	8	8
Presión de diseño [bar]	18	18	18	18	18	18
Peso vacío [kg/m]	2,4	5,3	6	7,5	14	3,5
Peso con LN [kg/m]	2,6	5,7	6,65	9	20,3	6,8
Cantidad LN para refrigeración LN [l/m]	0,21	0,42	0,70	1,20	2,95	0,38
Tasa de transferencia térmica						
Tubería sin estructuras internas [W/m]	0,45	0,50	0,60	0,70	1,30	1,1
o con respecto a LN [l/m °h]	0,010	0,012	0,014	0,016	0,030	0,025
por acoplamiento [W]	2,8	4,5	5,5	8,1	15,5	2,8
o con respecto a LN [l/m °h]	0,06	0,1	0,14	0,22	0,45	0,08